



UNIVERSIDAD DE CARABOBO

FACULTAD EXPERIMENTAL DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA

DEPARTAMENTO DE FÍSICA



Análisis numérico de la relajación de valles de Dirac en el grafeno

Trabajo Especial de Grado presentado ante la ilustre Universidad de Carabobo por el **BR. PRIETO S. ÁNGEL D.** para optar al título de Licenciado en Física

Tutores:

José Hugo García

CATALAN INSTITUTE OF NANOSCIENCE AND
NANOTECHNOLOGY

Nelson Bolívar

UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE CIENCIAS

Damarys Serrano

UNIVERSIDAD DE CARABOBO
FACULTAD DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA

Valencia, Venezuela

15 de agosto de 2020

Abstract	vi
Resumen	vii
Introducción	viii
1 Polinomios de Chebyshev	1
1.1 Polinomios de Chebyshev	1
1.2 Aproximación polinomial	2
1.3 Aproximación de funciones matriciales	3
2 Evolución Temporal	5
2.1 Aproximación de la función exponencial	5
2.2 Sobre la convergencia de la aproximación	7
3 Modelo de Cadena Lineal Mono-Atómica	11
3.1 Conductividad a temperatura cero	12
3.2 Zeeman splitting and spin dynamics	16
3.2.1 Magnetización en \hat{z}	18
Apéndices	19
Apéndices	19
A Resolución de la integral de la expresión	20
A.1 Para $m = n = 0$	20
A.2 Para $m \neq n = 0$	21

A.3 Para $m = n \neq 0$	22
A.4 Para $m \neq n$	22
B Conmutador $[\hat{U}_0, \hat{S}_i]$ para la cadena lineal	24
C Operador de Proyección Cuántico para la Cadena Lineal	25
D Operador de Espín para la Cadena Lineal Magnetizada en z	27
D.1 Inyección en \hat{z}	28
D.2 Inyección en \hat{x}	28
Bibliografía	29

2.1	Gráficas correspondientes al valor absoluto de las funciones de Bessel normalizadas en función de n para valores menores de 1×10^{-4} ; el eje x se presenta escalado por el factor \tilde{t}^{-1} . Se puede ver como a partir de un término crítico n_c las funciones de Bessel decaen pronunciadamente, donde $\frac{n}{\tilde{t}} \propto 1$, especialmente para valores altos de \tilde{t}	9
2.2	Comparación entre el cálculo analítico y la aproximación mediante polinomios de Chebyshev para el valor esperado amortiguado (por un factor $\alpha = 5 \times 10^{-3}$) del operador de evolución temporal $\hat{U} = \exp(-i\hat{S}_z\tilde{t})$, \hat{S}_z es la matriz de Pauli para el eje z y $\tilde{t} = \frac{J_{ex}t}{\hbar}$ donde $J_{ex} \cong 100\text{meV}$ es el acoplamiento de canje. La expresión analítica correspondiente al valor esperado es $2 \cos \tilde{t}$. En el recuadro se muestra la norma Euclideana cuadrada de la diferencia entre la función correspondiente al cálculo analítico f y su aproximación en serie de Chebyshev de orden N	10
3.1	Esquema de una cadena lineal mono-atómica, con una distancia inter-atómica a , energía in-situ ϵ_0 y una amplitud de salto entre vecinos cercanos t	11

ABSTRACT

We investigate the application of numerical approximations via Chebyshev expansions and the KPM to study valley dynamics present in graphene subject to external magnetic fields. The use of linear scaling quantum transport (LSQT) techniques allows the realistic approximation of the time evolution and the quantum projection operators; we validate the resulting algorithms by comparison of a linear chain system with periodic boundary conditions, which due to its simplicity allows us to approximate its properties using exact terms. Of specific interest is the study of the valley relaxation time in graphene, which is of importance in the characterization of valleytronics, an emerging area similar to spintronics, that centers on valley information transfer as well as the manipulation of its degrees of freedom.

Investigamos la aplicación de aproximaciones numéricas mediante expansiones de Chebyshev y el KPM para estudiar las dinámicas de valle presentes en grafeno sometido a campos magnéticos externos. El uso de técnicas de Transporte Cuántico de Escalamiento Lineal (LSQT por sus siglas en inglés) permite la aproximación realista de los operadores de evolución temporal y de proyección cuántica; validamos los algoritmos resultantes por comparación con un sistema de cadena lineal bajo condiciones de borde periódicas, el cual debido a su simplicidad nos permite aproximar sus propiedades con términos exactos. De interés específico es el estudio del tiempo de relajación en el grafeno, el cuál es de importancia en la caracterización de la valletrónica, un área emergente, similar a la espintrónica, que se centra en la transferencia de información mediante valles de Dirac así como la manipulación de sus grados de libertad.

Las características electrónicas del grafeno han causado fascinación desde sus primeros estudios debido a que al rededor de un par inequivalente de puntos mínimos en la banda de conducción, la energía presenta un cambio lineal respecto al vector de onda de los portadores de carga del material, formando una especie de valle en el cual los portadores de carga se comportan como Fermiones de Dirac no-masivos lo que le da a la región el nombre de *Valles de Dirac* (DiVincenzo et al. 1984; Gorbar et al. 2002; Kopelevich et al. 2003).

Asociado a los valles de Dirac se encuentran entonces un grado de libertad denominados como ‘*iso-espín de valle*’ o ‘*índices de valle*’, los cuales han sido considerados como portadores de información cuántica. Esta área se le conoce en la actualidad como ‘*valletrónica*’ (Schaibley et al. 2016), y se desarrolla en paralelo a la *espintrónica*. Ambas corrientes de investigación buscan alcanzar una electrónica de ultra-baja potencia, ya que la información pudiera ser transportada y procesada sin la necesidad de movilizar cargas, lo cual es la causa principal de disipación en la electrónica clásica. El interés por la valletrónica sobre la espintrónica radica en la robustez de los grados de libertad frente a perturbaciones electromagnéticas, ya que los valles no se acoplan con campos magnéticos externos como los espines.

Debido a la sencillez que presentan sus bandas energéticas, el interés asociado a sus peculiares portadores de carga, así como su fabricación cada vez más extendida hacen del grafeno un candidato excepcional para los estudios referentes a la valletrónica.

La aplicación de la valletrónica a tecnologías del mundo real depende del tiempo, que a su vez implica la distancia, en el cuál la información codificada mediante los índices de valle se pierde debido a la evolución del sistema a un estado de equilibrio termodinámico, correspondiente al *tiempo de relajación de valle*.

Para simular transporte electrónico existen distintos enfoques comunes, como la ecuación de transporte de Boltzmann y el formalismo de Landau-Büttiker. En este trabajo utilizaremos cálculos numéricos eficientes de formulación de Kubo y Kubo-Bastin, que en su expresión más general describen la respuesta lineal de un sistema sujeto a perturbaciones dependientes del tiempo (Garcia et al. 2018). Las formulas se pueden desarrollar en base a funciones con el Hamiltoniano del sistema como argumento; es por esto que para estudiar sistemas grandes, de escalas experimentales ($N > 10^6$ donde N es el número de átomos), es necesario que el costo computacional escale

linealmente con N , estos algoritmos se conocen como de orden- N o $\mathcal{O}(N)$ y forman la base de los métodos de Transporte Cuántico de Escalamiento Lineal (LSQT por sus siglas en inglés).

La aproximación de funciones matriciales mediante polinomios ortogonales clásicos, así como el *Kernel Polynomial Method* (KPM) con polinomios de Chebyshev, en el que se atenúan las oscilaciones de Gibbs, corresponden a métodos numéricos sobre los cuales se pueden desarrollar algoritmos $\mathcal{O}(N)$. Si se trabaja el Hamiltoniano con una base de enlace fuerte (TB por sus siglas en inglés) en el espacio real, lo que permite representar el operador como una matriz altamente dispersa y evita la necesidad de diagonalizar para trabajar en su auto-espacio, entonces el método resultante puede ser de alta eficiencia incluso para sistemas de gran tamaño o que no presenta simetrías de traslación.

De modo que el presente trabajo busca desarrollar un programa capaz de analizar la evolución temporal de la dinámica de valles de Dirac en el grafeno con el fin de estimar el tiempo de relajación de los índices de valle. Para el algoritmo se utilizará la formulación de Kubo aproximado mediante el KPM, con un modelo TB en espacio real. el algoritmo será validado por comparación directa con un modelo teórico de cadena lineal mono-atómica, antes de ser aplicado a un sistema de grafeno.

1.1 Polinomios de Chebyshev

Llamados así en honor al matemático ruso Pafnuty Chebyshev que los desarrolló con la intención de ser utilizados en la teoría de aproximaciones, son un conjunto de *Polinomios Ortogonales Clásicos*, que son solución de la ecuación diferencial de Chebyshev

$$(1 - x^2) \frac{d^2 y}{dx^2} - x \frac{dy}{dx} + p^2 y = 0.$$

Dentro de la clasificación como polinomios ortogonales clásicos, con primeros elementos generados por la fórmula de Rodríguez generalizada

$$F_n(x) = \frac{1}{K_n w(x)} \frac{d^n}{dx^n} (w(x) s^n(x)) \quad \forall n \in \mathbb{N},$$

donde K_n es un factor de normalización, $s(x)$ es un polinomio de segundo o menor grado con raíces reales, $w(x)$ es una función estrictamente positiva, integrable en el intervalo (a, b) con las condiciones de borde $w(a)s(a) = 0 = w(b)s(b)$, se encuentra la sub-clasificación de los polinomios de Jacobi, dados por la elección de s como un polinomio de grado 2, lo cual implica que $s(x) = x^2 + 1$, $w(x) = (x + 1)^\mu (x - 1)^\nu$ donde $\mu, \nu > -1$, $a = -1$ y $b = +1$.

Finalmente los polinomios de Chebyshev son una sub-clasificación de los polinomios de Jacobi, existiendo primera ($\mu = \nu = -\frac{1}{2}$) y segunda especie ($\mu = \nu = \frac{1}{2}$). Es de interés particular para lo aquí desarrollado únicamente los de primera especie. Para estos, se tiene que el factor de normalización de la fórmula de Rodríguez tiene un valor de

$$K_n = (-1)^n \frac{(2n)!}{2^n n!}$$

lo que implica una expresión trigonométrica para definir los polinomios de Chebyshev mediante funciones trigonométricas

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x) \quad |x| \leq 1, \quad (1.1)$$

y la relación de recurrencia de la forma

$$T_{n+1} = 2xT_n - T_{n-1},$$

donde $\{T_n\}_{n=0}^{\infty}$ son los polinomios de Chebyshev de primera especie.

1.2 Funciones aproximables mediante series de Chebyshev

Utilizando un conjunto de polinomios ortogonales (no necesariamente clásicos) como base, se pueden expandir funciones arbitrarias f pertenecientes al espacio de funciones integrables cuadradas ponderado en el intervalo $[a, b]$, es decir

$$f \in \mathcal{L}_w^2(a, b),$$

o lo que es lo mismo, las funciones cuya integral

$$\int_a^b w(x)|f(x)|^2 dx < \infty$$

esté definida.

Para el caso particular de los polinomios de Chebyshev de primera especie se tiene entonces que se pueden expandir funciones

$$f \in \mathcal{L}_{(1-x^2)^{-\frac{1}{2}}}^2(-1, 1).$$

La expansión se da mediante la expresión

$$|f\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{f}_n |T_n\rangle,$$

donde \bar{f}_n son los coeficientes de expansión, cuya expresión se obtiene mediante manipulaciones de la expansión de $|f\rangle$, inicialmente se multiplica por $\langle T_m|$ por la izquierda

$$\langle T_m|f\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{f}_n \langle T_m|T_n\rangle,$$

el producto de los polinomios de Chebyshev cumplen la relación de ortogonalidad

$$\langle T_m|T_n\rangle = \delta_n^m \frac{\pi}{2 - \delta_0^m},$$

donde δ_j^i es la delta de Kronecker; de modo que

$$\langle T_m | f \rangle = \frac{\pi}{2 - \delta_0^m} \bar{f}_m,$$

reordenando

$$\begin{aligned} \bar{f}_m &= \frac{2 - \delta_0^m}{\pi} \langle T_m | f \rangle \\ \bar{f}_m &= \frac{2 - \delta_0^m}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{T_m^*(x) f(x)}{\sqrt{1 - x^2}} dx \end{aligned} \quad (1.2)$$

Finalmente, para aproximar dichas funciones solo basta con truncar la serie de Chebyshev hasta un orden finito N , es decir

$$|f\rangle \sim \sum_{n=0}^N \bar{f}_n |T_n\rangle,$$

Sin embargo esta presenta oscilaciones de Gibbs alrededor de los puntos donde $f(x)$ no es continuamente diferenciable. Estas pueden ser amortiguadas mediante la convolución de la función con un núcleo $K(x)$ (Weiße et al. 2006), a esto se le conoce como el *kernel polynomial method* (KPM). La serie de Chebyshev presenta la ventaja de que esta convolución se puede incluir mediante la multiplicación de los coeficientes de expansión por un factor de amortiguamiento g_n dependiente del núcleo a utilizar,

$$|f\rangle \sim \sum_{n=0}^N \bar{f}_n g_n |T_n\rangle. \quad (1.3)$$

1.3 Aproximación de funciones matriciales

Dada una matriz *normal* \mathbf{A} , siguiendo el teorema de descomposición espectral compleja, se tiene que

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^r \lambda_i \mathbf{P}_i,$$

donde $\{\lambda_i\}_{i=1}^r$ son los autovalores de \mathbf{A} con operadores de proyección \mathbf{P}_i hacia cada autoespacio \mathcal{M}_i . Esto implica que para cualquier función f expandible en series de potencias

$$f(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^r f(\lambda_i) \mathbf{P}_i,$$

ahora se puede aproximar f mediante una expansión en polinomios de Chebyshev de primera especie

$$f(\mathbf{A}) \sim \sum_{i=1}^r \sum_{n=0}^{\infty} \bar{f}_n g_n T_n(\lambda_i) \mathbf{P}_i \quad \Longleftrightarrow \quad f \in \mathcal{L}_{(1-x^2)^{-\frac{1}{2}}}^2(-1, 1) \wedge \{\lambda_i\}_{i=1}^r \in [-1, 1],$$

conmutando las sumatorias y reduciendo, se tiene que

$$f(\mathbf{A}) \sim \sum_{n=0}^{\infty} \bar{f}_n g_n T_n(\mathbf{A}) \quad \Longleftrightarrow \quad f \in \mathcal{L}^2_{(1-x^2)^{-\frac{1}{2}}}(-1, 1) \wedge \{\lambda_i\}_{i=1}^r \in [-1, 1].$$

Para este capítulo, la principal referencia utilizada fue Hassani (2013).

CAPÍTULO 2

OPERADOR DE EVOLUCIÓN TEMPORAL CUÁNTICO

2.1 Aproximación de la función exponencial mediante el KPM.

Para la función exponencial

$$f(x) = e^{izx} \quad |x| \leq 1,$$

aplicando la aproximación (1.3) se tiene que

$$e^{izx} \sim \sum_{n=0}^N \overline{e^{iz}}_n g_n T_n(x). \quad (2.1)$$

Como la función exponencial es infinitamente diferenciable, no presentará oscilaciones de Gibbs, por lo que puede aproximarse con precisión arbitraria aumentando el número de polinomios. Esto significa que podemos escoger $g_n = 1$, el cual es conocido como kernel de Dirichlet. Para ganar intuición sobre la aproximación exponencial, consideraremos en primera instancia su aproximación lineal:

$$e^{ix} \approx 1 + ix \quad \forall |x| \ll 1,$$

y tomando en cuenta que los polinomios de Chebyshev para órdenes 0 y 1 corresponden a

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1, \\ T_1(x) &= x, \end{aligned}$$

entonces la expansión (2.1) se puede escribir como

$$e^{ix} \approx 1 + ix \sim \overline{e^{iz}}_0 T_0(x) + \overline{e^{iz}}_1 T_1(x) + \sum_{n=2}^N \overline{e^{iz}}_n T_n(x), \quad (2.2)$$

de donde se obtiene por comparación directa:

$$[\overline{e^{iz}}]_0 = 1, \quad [\overline{e^{iz}}]_1 = i \quad [\overline{e^{iz}}]_n = 0. \quad (2.3)$$

Como esperado, solo se necesitan los dos primeros polinomios aproximar la exponencial para argumentos pequeños. Vamos ahora a proceder a expandir la exponencial para argumento arbitrario, y verifiquemos entonces que los polinomios de Chebyshev permiten expandir de forma muy eficiente de esta función.

Para aplicar formalmente la expansión (2.1) es necesario entonces desarrollar los coeficientes Chebyshev, previo a ello se procede a desarrollar la expansión de Jacobi-Anger.

Esta identidad se relaciona con una forma integral de las funciones de Bessel de primera especie $\{J_n(z)\}_{n=0}^{\infty}$ que surgen como solución de la EDO de Bessel (Hassani 2013)

$$x^2 J_n'' + x J_n' + (x^2 - n^2) J_n = 0.$$

Mediante su función generadora

$$e^{\frac{z}{2}\left(t - \frac{1}{t}\right)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(z) t^n$$

se puede obtener su representación integral para órdenes enteros

$$J_n(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{in\vartheta - iz \sin \vartheta} d\vartheta$$

mediante un cambio de variable $\vartheta = \frac{\pi}{2} - \theta$

$$J_n(z) = \frac{i^{-n}}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} e^{in\theta - iz \cos \theta} d\theta,$$

de aquí es fácil apreciar que $i^n J_n(z)$ corresponden a los coeficientes de expansión para la expansión en serie de Fourier de la función periódica

$$e^{iz \cos \theta} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n J_n(z) e^{in\theta}.$$

Esta es la expansión de Jacobi-Anger, la cuál, aplicando la propiedad $J_{-n}(z) = (-1)^n J_n(z)$ se puede reescribir como

$$e^{iz \cos \theta} = J_0(z) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} i^n J_n(z) \cos(n\theta). \quad (2.4)$$

De modo que, los coeficientes de $\overline{e^{iz}}_n$, según (1.2), se definen como

$$\overline{e^{iz}}_n = \frac{2 - \delta_0^n}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{e^{izx} T_n(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx,$$

aplicando el cambio de variable $x = \cos \theta$ y expandiendo $T_n(x)$ según (3.12)

$$\overline{e^{iz}}_n = \frac{2 - \delta_0^n}{\pi} \int_0^\pi e^{iz \cos \theta} \cos(n\theta) d\theta,$$

aplicando la expansión de Jacobi-Anger (2.4)

$$\begin{aligned} \overline{e^{iz}}_n &= \frac{2 - \delta_0^n}{\pi} \left[J_0(z) \int_0^\pi \cos(n\theta) d\theta + \sum_{m=1}^{\infty} i^m J_m(z) \int_{-\pi}^\pi \cos(m\theta) \cos(n\theta) d\theta \right] \\ \overline{e^{iz}}_n &= i^n (2 - \delta_0^n) J_n(z). \end{aligned}$$

Sustituyendo los coeficientes en la aproximación de e^{izx} (2.1)

$$e^{izx} \sim \sum_{n=0}^N i^n (2 - \delta_0^n) g_n J_n(z) T_n(x), \quad (2.5)$$

2.2 Sobre la convergencia numérica de la exponencial imaginaria con dominio restringido.

Para estudiar la velocidad de convergencia de la serie truncada (2.5) en el dominio $x \in (-1, 1)$, primero es útil analizar individualmente cada uno de los factores de los términos de la sumatoria, principalmente los polinomios de Chebyshev y las funciones de Bessel de primera especie.

Para los polinomios de Chebyshev se tiene que

$$|T_n(x)| \leq 1 \quad \forall x \in [-1, 1] \wedge n \geq 0,$$

de modo que no aportan nada concreto al estudio de la velocidad a la que converge la serie y se puede descartar.

Para las funciones de Bessel de primera especie, se tiene que para valores de orden n enteros positivos mucho mayores al argumento z , las funciones de Bessel se aproximan como

$$J_n(z) \sim \frac{1}{n!} \left(\frac{z}{2} \right)^n,$$

donde para gran n el factorial se puede aproximar mediante la aproximación de Stirling $n! \sim \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e} \right)^n$

$$J_n(z) \sim (2\pi n)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{ez}{2n} \right)^n,$$

la cuál converge rápidamente para $2n > ez$.

Debido a que la velocidad de convergencia está ligada al parámetro z , es útil analizar específicamente para qué casos se aproximará la exponencial. Para la investigación corriente la exponencial se desea aproximar para el operador de evolución temporal cuántico

$$\hat{U}(t) = \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right), \quad (2.6)$$

para aproximarlo (mediante polinomios de Chebyshev) en función del hamiltoniano, hace falta reescalarlo para que sus autovalores se encuentren entre -1 y 1, es decir

$$\tilde{H} = \frac{\hat{H} - \bar{E}}{\Delta E}, \quad (2.7)$$

donde $\bar{E} = \frac{E_{\max} + E_{\min}}{2}$ es el centro de banda y $\Delta E = \frac{E_{\max} - E_{\min}}{2}$ es el ancho de banda.

Sustituyendo el hamiltoniano reescalado (2.7) en el operador de evolución temporal (2.6)

$$\begin{aligned} \hat{U}(t) &= \exp\left(\frac{i\Delta E \tilde{H} t}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{i\bar{E} t}{\hbar}\right) \\ \hat{U}(t) &= \exp\left(\frac{i\tilde{H} t}{\tau}\right) \exp\left(\frac{i\bar{E} t}{\hbar}\right) \\ \hat{U}(t) &= \exp\left(i\tilde{H} \tilde{t}\right) \exp\left(\frac{i\bar{E} t}{\hbar}\right), \end{aligned}$$

donde $\tau = \frac{\hbar}{\Delta E}$ tiene unidades en el orden de $\tau \sim \frac{0.6 \text{ eVfs}}{\text{eV}} = 0.6 \text{ fs}$ por lo cuál la escala de t está en el orden de los fs. El fenómeno a estudiar (el tiempo de relajación en transporte eléctrico) está en el orden de los fs a los ps (Garcia et al. 2018), de modo que el cociente $\frac{t}{\tau} = \tilde{t} \in [10^0, 10^4]$.

Todo esto implica que el argumento de las funciones de Bessel en la aproximación (2.5) está en el orden de 10^0 a 10^3 . Para estos valores se tiene que la función de Bessel decae rápidamente para órdenes $N \propto z$ (Garcia et al. 2018), tal como se puede observar en la Fig. 2.1, de esta se puede concluir además que la aproximación (2.5) se puede llevar a precisión arbitraria dependiente del número de términos a utilizar.

En la Fig. 2.2 se puede observar una demostración de la aproximación mediante los polinomios de Chebyshev para el valor esperado amortiguado del operador de evolución temporal. El amortiguamiento surge mediante el modelo de decoherencia cuántica, el cuál fue utilizado ya que otorga un enfoque más general a la demostración. En la gráfica se puede apreciar como la aproximación se sobrepone al valor analítico de la función, además de presentar que para órdenes de la aproximación mayores a 10^2 la norma cuadrada de la diferencia entre la función analítica y la aproximación tiende drásticamente a 0.

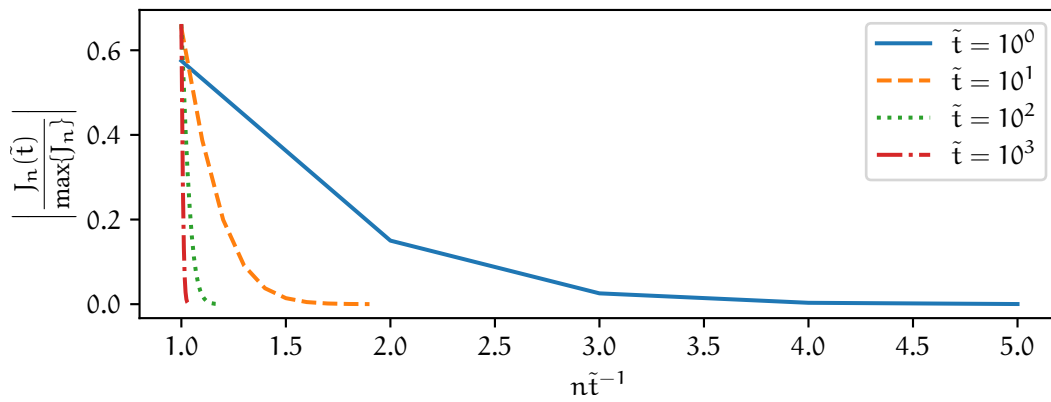


Figura 2.1: Gráficas correspondientes al valor absoluto de las funciones de Bessel normalizadas en función de n para valores menores de 1×10^{-4} ; el eje x se presenta escalado por el factor \tilde{t}^{-1} . Se puede ver como a partir de un término crítico n_c las funciones de Bessel decaen pronunciadamente, donde $\frac{n}{\tilde{t}} \propto 1$, especialmente para valores altos de \tilde{t} .

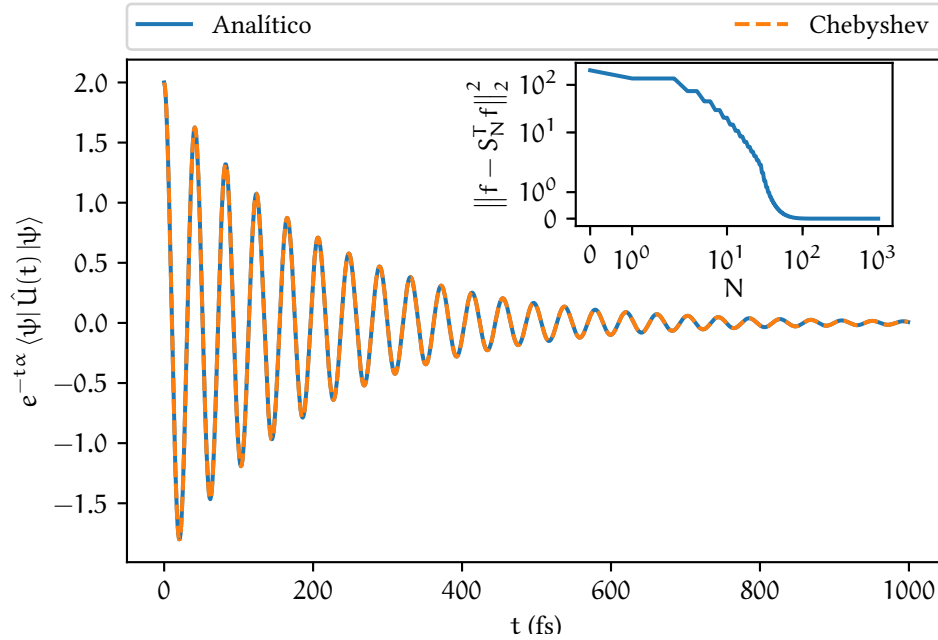


Figura 2.2: Comparación entre el cálculo analítico y la aproximación mediante polinomios de Chebyshev para el valor esperado amortiguado (por un factor $\alpha = 5 \times 10^{-3}$) del operador de evolución temporal $\hat{U} = \exp(-i\hat{S}_z\tilde{t})$, \hat{S}_z es la matriz de Pauli para el eje z y $\tilde{t} = \frac{J_{\text{ex}}t}{\hbar}$ donde $J_{\text{ex}} \cong 100\text{meV}$ es el acoplamiento de canje. La expresión analítica correspondiente al valor esperado es $2 \cos \tilde{t}$. En el recuadro se muestra la norma Euclidean cuadrada de la diferencia entre la función correspondiente al cálculo analítico f y su aproximación en serie de Chebyshev de orden N .

CAPÍTULO 3

MODELO DE CADENA LINEAL MONO-ATÓMICA

Como primer modelo a analizar, se utilizará un sólido cristalino mono-atómico de una sola dimensión (cadena lineal) (Fig. 3.1).

Dicho sistema se describe por el siguiente hamiltoniano de enlace fuerte

$$\hat{H} = \epsilon_0 \sum_{i=0}^{\infty} |x_i\rangle \langle x_i| - t \sum_{i=0}^{\infty} [|x_i + a\rangle \langle x_i| + |x_i\rangle \langle x_i + a|], \quad (3.1)$$

De aquí en adelante se asume una energía in-situ nula ($\epsilon_0 = 0$).

A este hamiltoniano se le hace un cambio de base, del espacio real ($|x_i\rangle$) al espacio recíproco ($|k\rangle$) mediante las relaciones

$$\sum_k |k\rangle \langle k| = 1, \quad (3.2)$$

$$\langle x|k\rangle = e^{ikx}, \quad (3.3)$$

de modo que

$$\hat{H} = -t \sum_i |x_i + a\rangle \langle x_i| + |x_i\rangle \langle x_i + a|,$$

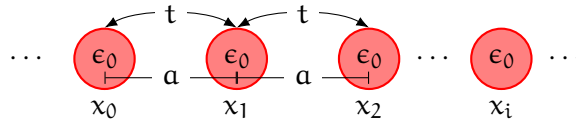


Figura 3.1: Esquema de una cadena lineal mono-atómica, con una distancia inter-atómica a , energía in-situ ϵ_0 y una amplitud de salto entre vecinos cercanos t .

aplicando la relación de completitud (3.2)

$$\hat{H} = -t \sum_{i,k,q} [|k\rangle \langle k|x_i + a\rangle \langle x_i|q\rangle \langle q| + |k\rangle \langle k|x_i\rangle \langle x_i + a|q\rangle \langle q|],$$

y sustituyendo las autofunciones del número de onda (3.3), se obtiene

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -t \sum_{i,k,q} \left[|k\rangle e^{-ik(x_i+a)} e^{iqx_i} \langle q| + |k\rangle e^{-ikx_i} e^{iq(x_i+a)} \langle q| \right], \\ \hat{H} &= -t \sum_{k,q} |k\rangle \langle q| \left(e^{iqa} + e^{-ika} \right) \sum_i e^{i(q-k)x_i}. \end{aligned}$$

La sumatoria $\sum_i e^{i(a-b)c_i}$ corresponde a la delta de kroneker δ_b^a

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -t \sum_{k,q} |k\rangle \langle q| \left(e^{iqa} + e^{-ika} \right) \delta_k^q, \\ \hat{H} &= -t \sum_k |k\rangle \langle k| \left(e^{ika} + e^{-ika} \right), \\ \hat{H} &= \sum_k |k\rangle \langle k| (-2t \cos(ka)), \end{aligned}$$

finalmente se establecen los autovalores $-2t \cos(ka) = \varepsilon(k)$, tal que

$$\hat{H} = \sum_k |k\rangle \langle k| \varepsilon(k). \quad (3.4)$$

3.1 Conductividad a temperatura cero

La conductividad a temperatura cero de este sistema se puede calcular mediante la formula de Kubo-Greenwood (Greenwood 1958)

$$\sigma(E) = \frac{\pi \hbar e^2}{\Omega} \text{Tr}[\delta(E - \hat{H}) \hat{V} \delta(E - \hat{H}) \hat{V}] \quad (3.5)$$

donde Ω corresponde al volumen del sistema (en el caso de la cadena lineal $\Omega = N$ el número de átomos en cadena),

$$\text{Tr}[\hat{A}] = \frac{1}{N} \sum_n \langle n | \hat{A} | n \rangle \quad (3.6)$$

corresponde a la traza (normalizada) sobre un conjunto base completo, $\delta(x)$ es la distribución de delta de Dirac y

$$\hat{V}_x = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{X}] \quad (3.7)$$

es el operador velocidad en la dirección x ;

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (3.8)$$

es el conmutador de \hat{A} con \hat{B} y

$$\hat{X} = i \frac{\partial}{\partial k_x} \quad (3.9)$$

Es el operador velocidad en dirección x escrito en la base del espacio recíproco.

Los elementos de matriz para el operador velocidad de la cadena lineal ($\hat{V}_x = \hat{V}$) quedan de la forma

$$\langle k | \hat{V} | k' \rangle = \langle k | \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{X}] | k' \rangle,$$

desarrollando el conmutador (3.8) y distribuyendo, se obtiene que

$$\langle k | \hat{V} | k' \rangle = \frac{i}{\hbar} [\langle k | \hat{H} \hat{X} | k' \rangle - \langle k | \hat{X} \hat{H} | k' \rangle]$$

cuya expansión dada por (3.1) y (3.9) resulta en

$$\langle k | \hat{V} | k' \rangle = \frac{i}{\hbar} \left[\langle k | \sum_q | q \rangle \langle q | \varepsilon(q) i \frac{\partial}{\partial k} | k' \rangle - \langle k | i \frac{\partial}{\partial k} \sum_q | q \rangle \langle q | \varepsilon(q) | k' \rangle \right]$$

aplicando el ket $\langle k |$ a la izquierda en el primer término y el ket $| k' \rangle$ en el segundo término, recordando que los vectores del número de ondas forman una base ortogonal, es decir $\langle k | q \rangle = \delta_q^k$, entonces

$$\langle k | \hat{V} | k' \rangle = -\frac{1}{\hbar} \left[\langle k | \varepsilon(k) \frac{\partial}{\partial k} | k' \rangle - \langle k | \frac{\partial}{\partial k} \varepsilon(k') | k' \rangle \right],$$

el segundo término se desarrolla mediante la regla del producto,

$$\langle k | \hat{V} | k' \rangle = -\frac{1}{\hbar} \left[\langle k | \varepsilon(k) \frac{\partial}{\partial k} | k' \rangle - \langle k | k' \rangle \frac{\partial \varepsilon(k')}{\partial k} - \langle k | \varepsilon(k) \frac{\partial}{\partial k} | k' \rangle \right],$$

finalmente, eliminando términos iguales se obtiene

$$\langle k | \hat{V} | k' \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial k} \delta_k^{k'} = \frac{2t}{\hbar} a \sin(ka) \delta_k^{k'}. \quad (3.10)$$

Las deltas de Dirac de la fórmula de Kubo-Greenwood (3.5) se aproximan mediante el KPM (Kernel Polynomial Method) (Weiße et al. 2006)

$$\delta(E - \hat{H}) \sim \frac{2}{\pi \Delta E \sqrt{1 - \tilde{E}^2}} \sum_{m=0}^M T_m(\tilde{E}) \frac{g_m^J T_m(\tilde{H})}{1 + \delta_0^m}, \quad (3.11)$$

donde $\Delta E = \frac{E_{\max} - E_{\min}}{2}$ es el ancho de banda,

$$T_m(x) = \cos(m \arccos(x)), \quad (3.12)$$

es el polinomio de Chebyshev de grado m , $\tilde{E} = \frac{E - \bar{E}}{\Delta E}$ es la energía reducida (y \tilde{H} es correspondientemente el hamiltoniano reducido), con $\bar{E} = \frac{E_{\max} + E_{\min}}{2}$ el centro de banda;

$$g_m^J = \frac{(M+1-m) \cos\left(\frac{\pi m}{M+1}\right) + \sin\left(\frac{\pi m}{M+1}\right) \cot\left(\frac{\pi}{M+1}\right)}{M+1} \quad (3.13)$$

corresponde a los factores asociados al kernel de Jackson para amortiguar las oscilaciones de Gibbs generadas por el truncamiento de la serie de Chebyshev a un número M finito de términos.

Con todo lo anterior, la conductividad a temperatura cero se aproxima como (asumiendo un mismo número de términos M para la aproximación polinómica de ambas deltas de Dirac)

$$\begin{aligned} \sigma(E) &\sim \frac{4\hbar e^2}{\pi \Omega \Delta E^2 (1 - \tilde{E}^2)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^M T_m(\tilde{E}) T_n(\tilde{E}) g_m^J g_n^J \frac{\text{Tr}[T_m(\tilde{H}) \hat{V} T_n(\tilde{H}) \hat{V}]}{(1 + \delta_0^m)(1 + \delta_0^n)}, \\ \sigma(E) &\sim \frac{4\hbar e^2}{\pi \Omega \Delta E^2 (1 - \tilde{E}^2)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^M T_m(\tilde{E}) T_n(\tilde{E}) g_m^J g_n^J \mu_n^m, \end{aligned} \quad (3.14)$$

de modo que es de interés analizar la traza en la expresión anterior para el caso específico de la cadena lineal.

Para los próximos análisis se asume una amplitud de salto entre vecinos cercanos $t = -\frac{1}{2}$, dado esto, las auto-energías, dadas por la función $E(k) = \varepsilon(E) \stackrel{t=-\frac{1}{2}}{=} \cos(ka)$, están acotadas por los valores $E_{\max} = 1$ y $E_{\min} = -1$, por lo tanto se tiene que $\Delta E = 1$, $\bar{E} = 0$, lo cual implica que $\tilde{E} = E$ y $\tilde{H} = \hat{H}$. De modo que la traza, desarrollada según (3.6), queda de la forma

$$\text{Tr}[T_m(\hat{H}) \hat{V} T_n(\hat{H}) \hat{V}] = \frac{1}{N} \sum_k \langle k | T_m(\hat{H}) \hat{V} T_n(\hat{H}) \hat{V} | k \rangle;$$

para cualquier función f expandible en serie de potencias, se tiene que $f(\hat{H}) = \sum_k |k\rangle \langle k| f(\varepsilon)$. Para los polinomios de Chebyshev $T_m(\hat{H}) = \sum_k |k\rangle \langle k| T_m(\varepsilon) = \sum_k |k\rangle \langle k| \cos(mka)$, dada la expresión de los polinomios de Chebyshev (3.12), así que

$$\text{Tr}[T_m(\hat{H}) \hat{V} T_n(\hat{H}) \hat{V}] = \frac{1}{N} \sum_k \langle k | \sum_{k'} |k'\rangle \langle k'| \cos(mk'a) \hat{V} T_n(\hat{H}) \hat{V} | k \rangle,$$

aprovechando la relación de completitud (3.2), entonces

$$\text{Tr}[T_m(\hat{H}) \hat{V} T_n(\hat{H}) \hat{V}] = \frac{1}{N} \sum_{k,q,q'} \langle k | \sum_{k'} |k'\rangle \langle k'| \cos(mk'a) | q \rangle \langle q | \hat{V} | q' \rangle \langle q' | T_n(\hat{H}) \hat{V} | k \rangle,$$

aplicando el $\langle k|$ por la derecha y expandiendo los elementos de matriz para el operador velocidad (3.10) se obtiene

$$\begin{aligned}\text{Tr}[T_m(\tilde{H})\hat{V}T_n(\tilde{H})\hat{V}] &= -\frac{\alpha}{\hbar N} \sum_{k,q} \langle k|q \rangle \cos(mka) \sin(qa) \langle q|T_n(\tilde{H})\hat{V}|k \rangle, \\ \text{Tr}[T_m(\tilde{H})\hat{V}T_n(\tilde{H})\hat{V}] &= -\frac{\alpha}{\hbar N} \sum_k \cos(mka) \sin(ka) \langle k|T_n(\tilde{H})\hat{V}|k \rangle,\end{aligned}$$

aplicando el mismo procedimiento para el elemento de matriz faltante, da

$$\text{Tr}[T_m(\tilde{H})\hat{V}T_n(\tilde{H})\hat{V}] = \left(\frac{\alpha}{\hbar}\right)^2 \frac{1}{N} \sum_k \sin^2(ka) \cos(mka) \cos(nka).$$

Adicionalmente se le establecen condiciones de frontera periódica a la cadena lineal, de modo que las auto-energías se cuantizan a aquellas correspondientes a los valores del vector de onda $ak_n = \frac{2\pi n}{N}$, con N el número de átomos en la cadena y el índice entero n va de 0 a N . Con esto se puede transformar la sumatoria en una integral sobre el espacio- k mediante la definición de la suma de Riemman

$$\text{Tr}[T_m(\tilde{H})\hat{V}T_n(\tilde{H})\hat{V}] = \left(\frac{\alpha}{\hbar}\right)^2 \frac{N}{2\pi N} \int_0^{2\pi} \sin^2(ka) \cos(mka) \cos(nka) d(ka). \quad (3.15)$$

Resolviendo la integral (ver Apéndice A),

$$\text{Tr}[T_m(\tilde{H})\hat{V}T_n(\tilde{H})\hat{V}] = \left(\frac{\alpha}{\hbar}\right)^2 \frac{1}{2\pi} \frac{\pi}{2} \left[\delta_n^m (1 + \delta_0^m) (1 - \frac{1}{2} \delta_1^m) - \frac{1}{2} (1 - \delta_n^m) (\delta_2^{m+n} + \delta_2^{|m-n|}) \right],$$

con esto se puede obtener la cantidad μ_n^m , presentada en la expresión (3.14),

$$\begin{aligned}\mu_n^m &= \left(\frac{\alpha}{2\hbar}\right)^2 \left[\delta_n^m \frac{(1 + \delta_0^m) (1 - \frac{1}{2} \delta_1^m)}{(1 + \delta_0^m)^2} - \frac{1}{2} (1 - \delta_n^m) \frac{\delta_2^{m+n} + \delta_2^{|m-n|}}{(1 + \delta_0^m) (1 + \delta_0^n)} \right], \\ \mu_n^m &= \left(\frac{\alpha}{2\hbar}\right)^2 \left[\delta_n^m \frac{(1 - \frac{1}{2} \delta_1^m) (1 + \delta_1^m)}{(1 + \delta_0^m) (1 + \delta_1^m)} - \frac{1}{2} (1 - \delta_n^m) \frac{\delta_2^{m+n} + \delta_2^{|m-n|}}{(1 + \delta_0^m) (1 + \delta_0^n)} \frac{1 - \frac{1}{2} \delta_0^m - \frac{1}{2} \delta_0^n}{1 - \frac{1}{2} \delta_0^m - \frac{1}{2} \delta_0^n} \right],\end{aligned}$$

Para $m \neq n$ la ecuación $m + n = 2$ solo tiene como resultados posibles los valores $(m, n) = \{(0, 2), (2, 0)\}$ por lo cual $\delta_2^{m+n} = \delta_0^m \delta_2^n + \delta_2^m \delta_0^n$,

$$\begin{aligned}\mu_n^m &= \left(\frac{\alpha}{2\hbar}\right)^2 \left[\frac{\delta_n^m}{(1 + \delta_0^m + \delta_1^m)} - \frac{1}{2} (1 - \delta_n^m) (\delta_0^m \delta_2^n + \delta_2^m \delta_0^n + \delta_2^{|m-n|}) (1 - \frac{1}{2} \delta_0^m - \frac{1}{2} \delta_0^n) \right], \\ \mu_n^m &= \left(\frac{\alpha}{2\hbar}\right)^2 \left[\frac{\delta_n^m}{(1 + \delta_0^m + \delta_1^m)} - \frac{1}{2} (1 - \delta_n^m) \delta_2^{|m-n|} \right].\end{aligned} \quad (3.16)$$

Sustituyendo esta expresión en la aproximación para la conductividad (3.14)

$$\begin{aligned}\sigma(E) &\sim \frac{4\hbar e^2}{N\pi(1-E^2)} \left(\frac{a}{2\hbar}\right)^2 \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^M T_m(E) T_n(E) g_m g_n \left[\frac{\delta_n^m}{(1+\delta_0^m+\delta_1^m)} - \frac{1}{2}(1-\delta_n^m)\delta_2^{|m-n|} \right], \\ \sigma(E) &\sim \frac{a^2 e^2}{Nh(1-E^2)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^M T_m(E) T_n(E) g_m g_n \left[\frac{\delta_n^m}{(1+\delta_0^m+\delta_1^m)} - \frac{1}{2}(1-\delta_n^m)\delta_2^{|m-n|} \right].\end{aligned}\quad (3.17)$$

3.2 Zeeman splitting and spin dynamics

Un tipo de sistema interesante son los ferromagnétos, donde el espín de sus electrones itinerantes interactúan con los momentos magnéticos localizados típicamente en los orbitales d. Para describir esta situación, vamos a suponer que el sistema es ferromagnético y tiene una magnetización homogénea de $\mathbf{M} = M_s \hat{\mathbf{u}}_{\mathbf{M}}$, donde M_s su valor de saturación y $\hat{\mathbf{u}}_{\mathbf{M}} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ su dirección definida por los ángulos ϕ y θ . Luego, asumiremos que la magnetización se acopla con los electrones por medio de una interacción de intercambio cuantificada por el parámetro J_{ex} . Vamos a suponer además que el sistema puede ser modelado por una cadena lineal de primeros vecinos, en este caso, el Hamiltoniano es dado por:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{ex}}, \quad (3.18)$$

donde

$$\hat{H}_0 = -t \sum_{i,s} [|x_i + a, s\rangle \langle x_i, s| + |x_i, s\rangle \langle x_i + a, s|], \quad (3.19)$$

representa la componente orbital, con t el hopping de primeros vecinos. Luego,

$$\hat{H}_{\text{ex}} = -J_{\text{ex}} \sum_{i,s,s'} (\hat{\mathbf{u}}_{\mathbf{M}} \cdot \boldsymbol{\sigma})_{s,s'} |x_i, s\rangle \langle x_i, s'| \quad (3.20)$$

representa a la interacción de intercambio, donde $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x \hat{\mathbf{x}} + \sigma_y \hat{\mathbf{y}} + \sigma_z \hat{\mathbf{z}}$ es el vector de Pauli y

$$\sigma_0 = \mathbb{1}_{2 \times 2} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \sigma_x = \sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},$$

son operadores conocidos como matrices de Pauli que describen la polarización del espín. $s = \pm 1$ identifica a los autovalores de la matriz de Pauli σ_z ,

El elemento \hat{H}_0 es diagonal en el espacio de espín, por lo tanto, su representación en el espacio es idéntica a la realizada anteriormente (3.4). La representación del Hamiltoniano en el espacio k sería

$$\hat{H}_0 = \sum_{k,s} |k, s\rangle \langle k, s| \varepsilon(k),$$

con $\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t \cos(ka)$ la relación de dispersión de la cadena lineal.

Por otro lado, el término \hat{H}_{ex} es diagonal proporcional a la identidad en el espacio de las posiciones por lo que es invariante ante una transformada de Fourier, permaneciendo idéntico en la nueva base

$$\hat{H}_{\text{ex}} = -J_{\text{ex}} \sum_{\mathbf{k}, s} |\mathbf{k}, s\rangle \langle \mathbf{k}, s' | (\hat{\mathbf{u}}_{\mathbf{M}} \cdot \boldsymbol{\sigma})_{s, s'},$$

Nuestra intención es determinar la evolución macroscópica en el tiempo de la i -ésima componente del vector de spin, una vez que se inyecta una distribución de electrones fuera del equilibrio polarizada en la dirección $\hat{\mathbf{u}}_q = (\sin \gamma \cos \varphi, \sin \gamma \sin \varphi, \cos \gamma)$ a un nivel de Fermi E_F dado.

Para esto, determinaremos el valor esperado en la representación de Heisenberg:

$$\langle \hat{S}_i(E_F, \gamma, \varphi, t) \rangle = \text{Tr} \left[\hat{\mathbf{U}}^\dagger(t) \hat{S}_i \hat{\mathbf{U}}(t) \hat{\rho}(E_F, \gamma, \varphi) \right], \quad (3.21)$$

donde

$$\hat{S}_i(E_F) = \frac{\hbar}{2} \sigma_i, \quad (3.22)$$

el operador de espín, $\hat{\mathbf{U}}(t) = \exp\left(\frac{i\hat{\mathbf{H}}t}{\hbar}\right)$ el operador de evolución temporal, y $\hat{\rho}(E_F)$ la matriz densidad. La ventaja de utilizar la representación de Heisenberg por sobre la Schrödinger proviene del hecho de que la primera permite de extender los resultados a muchos cuerpos de forma directa, mientras que la segunda el proceso es mucho mas complejo. Para nuestro caso consideraremos la siguiente matriz densidad

$$\hat{\rho}(E_F, \gamma, \varphi) = P(\gamma, \varphi) \delta(\hat{H} - E_F) P(\gamma, \varphi), \quad (3.23)$$

donde $P(\gamma, \varphi) = |s, \gamma, \varphi\rangle \langle s, \gamma, \varphi|$ el operador proyección de spin con autovalor $s = \pm 1$ en la dirección $\hat{\mathbf{u}}_q$. Esta matriz densidad se utiliza para representar el hecho de que los únicos electrones móviles son los que viven en el nivel de Fermi, y a estos se les está dotando con una polarización inicial. Como \hat{H}_{ex} conmuta con \hat{H}_0 , la fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff nos indica que podemos factorizar el operador evolución

$$\hat{\mathbf{U}}(t) = \hat{\mathbf{U}}_0(t) \exp\left(\frac{i\hat{H}_{\text{ex}}t}{\hbar}\right), \quad (3.24)$$

donde hemos definido $\hat{\mathbf{U}}_0(t) \equiv \exp\left(\frac{i\hat{H}_0t}{\hbar}\right)$. Con lo que, si escogemos la base de los momentos y σ_z para calcular la traza nos permite escribir:

$$\langle \hat{S}_i(E_F, \gamma, \varphi, t) \rangle = \sum_{\mathbf{k}, s} \langle \mathbf{k}, s | \exp\left(-\frac{i\hat{H}_{\text{ex}}t}{\hbar}\right) \hat{\mathbf{U}}_0^\dagger(t) \hat{S}_i \hat{\mathbf{U}}_0(t) \exp\left(\frac{i\hat{H}_{\text{ex}}t}{\hbar}\right) P(\gamma, \varphi) \delta(\hat{H} - E) P(\gamma, \varphi) | \mathbf{k}, s \rangle, \quad (3.25)$$

donde si usamos la unitariedad de $\hat{U}_0(t)$ y el hecho de que conmuta con el operador de espín (ver [Apéndice B](#)), obtenemos

$$\langle \hat{S}_i(E_F, t) \rangle = \sum_{k,s} \langle s | \exp\left(-\frac{i\hat{H}_{\text{ext}}t}{\hbar}\right) \hat{S}_i \exp\left(\frac{i\hat{H}_{\text{ext}}t}{\hbar}\right) P(\gamma, \varphi) \delta(\varepsilon(k) - J_{\text{ex}} \hat{u}_{\mathbf{M}} \cdot \sigma - E) P(\gamma, \varphi) | s \rangle. \quad (3.26)$$

donde además usamos el hecho de que la delta de Dirac es diagonal en el espacio de momentos.

Ahora bien, si definimos $\Theta \equiv -J_{\text{ex}}t/\hbar$, y $\sigma_u = \hat{u}_{\mathbf{M}} \cdot \sigma$, podemos demostrar entonces que (ver [Apéndice ??](#))

$$\exp\left(\frac{i\hat{H}_{\text{ext}}t}{\hbar}\right) = R_u(\Theta) \quad (3.27)$$

donde $R_u(\Theta) = \exp(i\Theta s_u)$ no es más que el operador de rotación en la dirección definida por la magnetización cuyo ángulo de rotación depende del tiempo, el cual se puede expresar en términos de las matrices de Pauli como:

$$R_u(\Theta) = \cos \Theta + i\sigma_u \sin \Theta. \quad (3.28)$$

Por lo que vemos entonces que el papel de la magnetización es hacer el espín precesar.

3.2.1 Magnetización en \hat{z}

En este caso tenemos

$$\langle \hat{S}_i(E_F, t) \rangle = \sum_{k,s} \exp\left(\frac{iJ_{\text{ex}}st}{\hbar}\right) \langle s | \hat{S}_i \exp\left(\frac{i\hat{H}_{\text{ext}}t}{\hbar}\right) P(\gamma, \varphi) \delta(\varepsilon(k) - J_{\text{ex}}\sigma_z - E) P(\gamma, \varphi) | s \rangle. \quad (3.29)$$

Inyección en \hat{z}

Si la inyección ocurre en z se tiene que $P(0,0) = |+\rangle \langle +|$, por lo que el vector espín será (ver [Apéndice D](#))

$$\langle \hat{\mathbf{S}}(E_F, t) \rangle = \sum_k \delta(\varepsilon(k) - J_{\text{ex}} - E) \hat{\mathbf{z}}. \quad (3.30)$$

Inyección en \hat{x}

Si la inyección ocurre en x se tiene que $P(\frac{\pi}{2}, 0) = |+\rangle \langle +|$, por lo que el vector espín será

$$\langle \hat{\mathbf{S}}(E_F, t) \rangle = \frac{1}{2} \left[\text{Re} \left\{ \exp\left(\frac{2iJ_{\text{ext}}t}{\hbar}\right) \right\} \hat{\mathbf{x}} + \text{Im} \left\{ \exp\left(\frac{2iJ_{\text{ext}}t}{\hbar}\right) \right\} \hat{\mathbf{y}} \right] \sum_{k,s} \delta(\varepsilon(k) - sJ_{\text{ex}} - E). \quad (3.31)$$

Apéndice

APÉNDICE A

RESOLUCIÓN DE LA INTEGRAL DE LA EXPRESIÓN

La integral resultante de la traza (3.15) se puede resolver caso por caso para distintas ligaduras sobre los índices m y n antes de escribirla en una expresión general.

A.1 Para $m = n = 0$

La integral se reduce a

$$\int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos(mx) \cos(nx) dx = \int_0^{2\pi} \sin^2(x) dx,$$

en la cuál se aplica la propiedad $\sin^2(x) = \frac{1}{2}[1 - \cos(2x)]$, obteniendo

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \sin^2(x) dx &= \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} [1 - \cos(2x)] dx, \\ \int_0^{2\pi} \sin^2(x) dx &= \frac{1}{2} \left[x \Big|_0^{2\pi} - \frac{1}{2} \sin(2x) \Big|_0^{2\pi} \right], \\ \int_0^{2\pi} \sin^2(x) dx &= \frac{2\pi}{2} = \pi. \end{aligned} \tag{A.1}$$

A.2 Para $m \neq n = 0$

Para desarrollar las siguientes integrales es necesario tener en cuenta la relación de ortogonalidad del coseno

$$\int_0^{2\pi} \cos(mx) \cos(nx) dx = \pi \delta_n^m (1 + \delta_0^m). \quad (\text{A.2})$$

Bajo estas ligaduras la integral toma la expresión

$$\int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos(mx) \cos(nx) dx = \int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos(mx) dx.$$

Desarrollando por integración por partes

$$\int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos(mx) dx = \frac{1}{m} \sin(mx) \sin^2(x) \Big|_0^{2\pi} - \frac{2}{m} \int_0^{2\pi} \cos(x) \sin(x) \sin(mx) dx,$$

la integral resultante se puede expandir mediante la propiedad trigonométrica

$$\sin(\alpha) \sin(\beta) = \frac{1}{2} [\cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)]$$

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos(mx) dx &= 0 - \frac{1}{m} \int_0^{2\pi} \cos(x) [\cos((1-m)x) - \cos((1+m)x)] dx, \\ \int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos(mx) dx &= -\frac{1}{m} \left[\int_0^{2\pi} \cos(x) \cos((1-m)x) dx - \int_0^{2\pi} \cos(x) \cos((1+m)x) dx \right]; \end{aligned}$$

resolviendo las integrales mediante la relación de ortogonalidad (A.2)

$$\int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos(mx) dx = -\frac{\pi}{m} \left[\delta_{m-1}^1 (\delta_0^1 + 1) - \delta_1^{m+1} (\delta_0^1 + 1) \right].$$

La ligadura $m \neq 0 \implies \delta_1^{m+1} = 0$ y $\delta_1^{m-1} = \delta_2^m$, así que finalmente

$$\int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos(mx) dx = -\frac{\pi}{2} \delta_2^m. \quad (\text{A.3})$$

A.3 Para $m = n \neq 0$

Con esto, la integral queda como

$$\int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos(mx) \cos(nx) dx = \int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos^2(mx) dx.$$

Para resolver, se aplica la propiedad trigonométrica $\cos^2(x) = \frac{1}{2}[1 + \cos(2x)]$,

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos^2(mx) dx &= \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \sin^2(x) [1 + \cos(2mx)] dx, \\ \int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos^2(mx) dx &= \frac{1}{2} \left[\int_0^{2\pi} \sin^2(x) dx + \int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos(2mx) dx \right], \end{aligned}$$

Sustituyendo los valores para la primera y segunda integral por los resultados anteriores (A.1) y (A.3) respectivamente,

$$\int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos^2(mx) dx = \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{\pi}{2} \delta_2^{2m} \right),$$

lo cual resulta en

$$\int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos^2(mx) dx = \frac{\pi}{2} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_1^m \right). \quad (\text{A.4})$$

A.4 Para $m \neq n$

Finalmente hay que resolver la integral

$$\int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos(mx) \cos(nx) dx,$$

para ello aplicamos la propiedad trigonométrica $\cos(\alpha) \cos(\beta) = \frac{1}{2}[\cos(\alpha + \beta) + \cos(\alpha - \beta)]$, obteniendo

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos(mx) \cos(nx) dx &= \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \sin^2(x) [\cos((m+n)x) + \cos((m-n)x)] dx, \\ \int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos(mx) \cos(nx) dx &= \frac{1}{2} \left[\int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos((m+n)x) dx + \int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos((m-n)x) dx \right], \end{aligned}$$

sustituyendo lo obtenido de la integral (A.3) tenemos que

$$\int_0^{2\pi} \sin^2(x) \cos(mx) \cos(nx) dx = \frac{1}{2} \left(-\frac{\pi}{2} \delta_{m+n}^2 - \frac{\pi}{2} \delta_2^{|m-n|} \right) = -\frac{\pi}{4} \left(\delta_2^{m+n} + \delta_2^{|m-n|} \right). \quad (A.5)$$

Es sencillo confirmar que estableciendo la condición $n = 0$, se recupera lo obtenido en la integral (A.3).

APÉNDICE B

CONMUTADOR DE LOS OPERADORES DE EVOLUCIÓN TEMPORAL DE LA CADENA LINEAL Y ESPÍN

$$\begin{aligned} [\hat{u}_0, \hat{s}_i] &= \frac{\hbar}{2} \left[\exp\left(\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right), \sigma_i \right], \\ [\hat{u}_0, \hat{s}_i] &= \frac{\hbar}{2} \left[\sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}| \exp\left(\frac{i\epsilon(\mathbf{k})t}{\hbar}\right) \sigma_0 \sigma_i - \sigma_i \sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}| \exp\left(\frac{i\epsilon(\mathbf{k})t}{\hbar}\right) \sigma_0 \right], \end{aligned}$$

Recordando que $\sigma_0 = \mathbb{1}_{2 \times 2}$, entonces

$$\begin{aligned} [\hat{u}_0, \hat{s}_i] &= \frac{\hbar}{2} \sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}| \left[\exp\left(\frac{i\epsilon(\mathbf{k})t}{\hbar}\right) \sigma_i - \exp\left(\frac{i\epsilon(\mathbf{k})t}{\hbar}\right) \sigma_i \sigma_0 \right], \\ [\hat{u}_0, \hat{s}_i] &= 0. \end{aligned} \tag{B.1}$$

APÉNDICE C

OPERADOR DE PROYECCIÓN CUÁNTICO PARA LA CADENA LINEAL

$$\begin{aligned}
 \delta(\hat{H} - E) &= \lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(\hat{H} - E)^2}{2\sigma^2}\right), \\
 \delta(\hat{H} - E) &= \lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{ex}} - E)^2}{2\sigma^2}\right), \\
 \delta(\hat{H} - E) &= \lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{[(\varepsilon(\mathbf{k}) - E)\sigma_0 - J_{\text{ex}}\sigma_u]^2}{2\sigma^2}\right), \\
 \delta(\hat{H} - E) &= \lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{[(\varepsilon(\mathbf{k}) - E)^2\sigma_0 - 2J_{\text{ex}}(\varepsilon(\mathbf{k}) - E)\sigma_u + J_{\text{ex}}^2\sigma_u^2]}{2\sigma^2}\right),
 \end{aligned}$$

Para las matrices de Pauli se cumple que $\sigma_u^2 = \sigma_0$

$$\begin{aligned}
 \delta(\hat{H} - E) &= \lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{[(\varepsilon(\mathbf{k}) - E)^2 + J_{\text{ex}}^2 - 2J_{\text{ex}}(\varepsilon(\mathbf{k}) - E)\sigma_u]}{2\sigma^2}\right), \\
 \delta(\hat{H} - E) &= \lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(\varepsilon(\mathbf{k}) - E)^2 + J_{\text{ex}}^2}{2\sigma^2}\right) \exp\left(\frac{J_{\text{ex}}(\varepsilon(\mathbf{k}) - E)\sigma_u}{\sigma^2}\right). \quad (\text{C.1})
 \end{aligned}$$

Si asumimos el caso particular $\hat{u}_{\mathbf{M}} = \hat{z} \implies \sigma_u = \sigma_z$, el operador de proyección toma la

forma

$$\begin{aligned}
 \delta(\hat{H} - E) &= \lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(\varepsilon(k) - E)^2 + J_{\text{ex}}^2}{2\sigma^2}\right) \exp\left(\frac{J_{\text{ex}}(\varepsilon(k) - E)\sigma_z}{\sigma^2}\right), \\
 \delta(\hat{H} - E) &= \sum_s |s\rangle\langle s| \lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(\varepsilon(k) - E)^2 + J_{\text{ex}}^2}{2\sigma^2}\right) \exp\left(\frac{J_{\text{ex}}(\varepsilon(k) - E)s}{\sigma^2}\right), \\
 \delta(\hat{H} - E) &= \sum_s |s\rangle\langle s| \lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(\varepsilon(k) - E)^2 - s2J_{\text{ex}}(\varepsilon(k) - E) + J_{\text{ex}}^2}{2\sigma^2}\right), \\
 \delta(\hat{H} - E) &= \sum_s |s\rangle\langle s| \lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(\varepsilon(k) - E - sJ_{\text{ex}})^2}{2\sigma^2}\right), \\
 \delta(\hat{H} - E) &= \sum_s |s\rangle\langle s| \delta(\varepsilon(k) - E - sJ_{\text{ex}}). \tag{C.2}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \sum_{k,s} \delta(\varepsilon(k) - sJ_{\text{ex}} - E) &= \frac{N}{2\pi} \sum_s \int_0^{2\pi} \delta(\varepsilon(ka) - sJ_{\text{ex}} - E) d(ka), \\
 \sum_{k,s} \delta(\varepsilon(k) - sJ_{\text{ex}} - E) &= \frac{N}{2\pi} \sum_s \int_0^{2\pi} \delta(-2t \cos(ka) - sJ_{\text{ex}} - E) d(ka),
 \end{aligned}$$

aplicando la propiedad de la integral de la delta de Dirac compuesta por una función f , $\int_R \delta(f(x)) dx = \sum_i |f'(x_i)|^{-1}$, donde x_i son los ceros de la función f en la región R , obtenemos entonces

$$\begin{aligned}
 \sum_{k,s} \delta(\varepsilon(k) - sJ_{\text{ex}} - E) &= \frac{N}{2\pi} \sum_{s,i} |2ta \sin(k_i a)|^{-1}, \\
 \sum_{k,s} \delta(\varepsilon(k) - sJ_{\text{ex}} - E) &= \frac{N}{4\pi|t|a} \sum_s \left[\left| \sin\left(\text{acos}\left(\frac{E + sJ_{\text{ex}}}{-2t}\right)\right) \right|^{-1} + \left| \sin\left(2\pi - \text{acos}\left(\frac{E + sJ_{\text{ex}}}{-2t}\right)\right) \right|^{-1} \right], \\
 \sum_{k,s} \delta(\varepsilon(k) - sJ_{\text{ex}} - E) &= \frac{N}{2\pi|t|a} \sum_s \left| \sin\left(\text{acos}\left(\frac{E + sJ_{\text{ex}}}{-2t}\right)\right) \right|^{-1}, \\
 \sum_{k,s} \delta(\varepsilon(k) - sJ_{\text{ex}} - E) &= \frac{N}{2\pi|t|a} \sum_s \left[1 - \frac{(E + sJ_{\text{ex}})^2}{4t^2} \right]^{-1/2}, \\
 \sum_{k,s} \delta(\varepsilon(k) - sJ_{\text{ex}} - E) &= \frac{N}{2\pi|t|a} \sum_s \frac{2|t|}{\sqrt{4t^2 - (E + sJ_{\text{ex}})^2}}, \\
 \sum_{k,s} \delta(\varepsilon(k) - sJ_{\text{ex}} - E) &= \frac{N}{\pi a} \left[\frac{1}{\sqrt{4t^2 - (E + J_{\text{ex}})^2}} + \frac{1}{\sqrt{4t^2 - (E - J_{\text{ex}})^2}} \right]
 \end{aligned}$$

APÉNDICE D

OPERADOR DE ESPÍN PARA LA CADENA LINEAL MAGNETIZADA EN Z

Antes de desarrollar la expresión de la magnetización en $\hat{\mathbf{z}}$ para inyecciones en x y $\hat{\mathbf{z}}$, es de utilidad definir los elementos de matriz del vector de Pauli en la base de σ_z ,

$$\begin{aligned}\langle s|\hat{\mathbf{S}}|s'\rangle &= \langle s|\hat{S}_x|s'\rangle \hat{\mathbf{x}} + \langle s|\hat{S}_y|s'\rangle \hat{\mathbf{y}} + \langle s|\hat{S}_z|s'\rangle \hat{\mathbf{z}}, \\ \langle s|\hat{\mathbf{S}}|s'\rangle &= (1 - \delta_{s,s'})\hat{\mathbf{x}} + s'\hat{\mathbf{i}}(1 - \delta_{s,s'})\hat{\mathbf{y}} + s\delta_{s,s'}\hat{\mathbf{z}}, \\ \langle s|\hat{\mathbf{S}}|s'\rangle &= (1 - \delta_{s,s'})(\hat{\mathbf{x}} + s'\hat{\mathbf{i}}\hat{\mathbf{y}}) + s\delta_{s,s'}\hat{\mathbf{z}}.\end{aligned}$$

Con esta cantidad definida, podemos reescribir cómodamente la expresión de el valor esperado para operador de espín dada una magnetización en $\hat{\mathbf{z}}$ (3.29)

$$\langle \hat{\mathbf{S}}(E_F, t) \rangle = \sum_{k,s} \exp\left(\frac{iJ_{\text{ex}}st}{\hbar}\right) \langle s|\hat{\mathbf{S}} \exp\left(\frac{i\hat{H}_{\text{ex}}t}{\hbar}\right) P(\gamma, \varphi) \delta(\varepsilon(k) - J_{\text{ex}}\sigma_z - E) P(\gamma, \varphi) |s\rangle,$$

Aplicando la relación de completitud en la base de σ_z y escribiendo la matriz de la delta de Dirac según (C.2),

$$\langle \hat{\mathbf{S}}(E_F, t) \rangle = \sum_{k,s,s'} \exp\left(\frac{iJ_{\text{ex}}t(s-s')}{\hbar}\right) \langle s|\hat{\mathbf{S}}|s'\rangle \langle s'| P(\gamma, \varphi) \sum_{s''} |s''\rangle \delta(\varepsilon(k) - s''J_{\text{ex}} - E) \langle s''| P(\gamma, \varphi) |s\rangle, \quad (\text{D.1})$$

queda entonces una expresión general para las distintas inyecciones electrónicas definidas por (γ, φ) .

D.1 Inyección en $\hat{\mathbf{z}}$

La inyección en $\hat{\mathbf{z}}$ implica que $P(0, 0) = |+\rangle\langle +|$, por lo cual

$$\begin{aligned}\langle \hat{\mathbf{S}}(E_F, t) \rangle &= \sum_{k, s, s', s''} \exp\left(\frac{iJ_{\text{ex}} t(s - s')}{\hbar}\right) \langle s | \hat{\mathbf{S}} | s' \rangle \langle s' | + \rangle \langle + | s'' \rangle \delta(\epsilon(k) - s''J_{\text{ex}} - E) \langle s'' | + \rangle \langle + | s \rangle, \\ \langle \hat{\mathbf{S}}(E_F, t) \rangle &= \sum_{k, s, s', s''} \delta_+^s \delta_+^{s'} \delta_+^{s''} \exp\left(\frac{iJ_{\text{ex}} t(s - s')}{\hbar}\right) [(1 - \delta_{s'}^s)(\hat{\mathbf{x}} + s' i \hat{\mathbf{y}}) + s \delta_{s'}^s \hat{\mathbf{z}}] \delta(\epsilon(k) - s''J_{\text{ex}} - E), \\ \langle \hat{\mathbf{S}}(E_F, t) \rangle &= \sum_k \delta(\epsilon(k) - J_{\text{ex}} - E) \hat{\mathbf{z}}.\end{aligned}\tag{D.2}$$

D.2 Inyección en $\hat{\mathbf{x}}$

La inyección en $\hat{\mathbf{x}}$ implica que $P(\frac{\pi}{2}, 0) = |+\rangle\langle +|$, $P(\frac{\pi}{2}, 0) = |+\rangle\langle +|$, $P(\frac{\pi}{2}, 0) = |+\rangle\langle +|$, por lo cual

$$\langle \hat{\mathbf{S}}(E_F, t) \rangle = \sum_{k, s, s', s''} \exp\left(\frac{iJ_{\text{ex}} t(s - s')}{\hbar}\right) \langle s | \hat{\mathbf{S}} | s' \rangle \langle s' | +, \hat{\mathbf{x}} \rangle \langle +, \hat{\mathbf{x}} | s'' \rangle \delta(\epsilon(k) - s''J_{\text{ex}} - E) \langle s'' | +, \hat{\mathbf{x}} \rangle \langle +, \hat{\mathbf{x}} | s \rangle,$$

para los autovectores de las matrices de Pauli, se tiene que $\langle s | +, \hat{\mathbf{x}} \rangle = \langle +, \hat{\mathbf{x}} | s \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$ por lo cuál la expresión anterior se reduce a

$$\begin{aligned}\langle \hat{\mathbf{S}}(E_F, t) \rangle &= \frac{1}{4} \sum_{k, s, s', s''} \exp\left(\frac{iJ_{\text{ex}} t(s - s')}{\hbar}\right) \langle s | \hat{\mathbf{S}} | s' \rangle \delta(\epsilon(k) - s''J_{\text{ex}} - E), \\ \langle \hat{\mathbf{S}}(E_F, t) \rangle &= \frac{1}{4} \sum_{k, s, s', s''} \exp\left(\frac{iJ_{\text{ex}} t(s - s')}{\hbar}\right) [(1 - \delta_{s'}^s)(\hat{\mathbf{x}} + s' i \hat{\mathbf{y}}) + s \delta_{s'}^s \hat{\mathbf{z}}] \delta(\epsilon(k) - s''J_{\text{ex}} - E), \\ \langle \hat{\mathbf{S}}(E_F, t) \rangle &= \frac{1}{4} \sum_s \left[\exp\left(\frac{s 2iJ_{\text{ex}} t}{\hbar}\right) (\hat{\mathbf{x}} - s i \hat{\mathbf{y}}) + s \hat{\mathbf{z}} \right] \sum_{k, s''} \delta(\epsilon(k) - s''J_{\text{ex}} - E), \\ \langle \hat{\mathbf{S}}(E_F, t) \rangle &= \frac{1}{4} \left[\exp\left(\frac{2iJ_{\text{ex}} t}{\hbar}\right) (\hat{\mathbf{x}} - i \hat{\mathbf{y}}) + \exp\left(\frac{-2iJ_{\text{ex}} t}{\hbar}\right) (\hat{\mathbf{x}} + i \hat{\mathbf{y}}) + \hat{\mathbf{z}} - \hat{\mathbf{z}} \right] \sum_{k, s''} \delta(\epsilon(k) - s''J_{\text{ex}} - E), \\ \langle \hat{\mathbf{S}}(E_F, t) \rangle &= \frac{1}{2} \left[\text{Re} \left\{ \exp\left(\frac{2iJ_{\text{ex}} t}{\hbar}\right) \right\} \hat{\mathbf{x}} + \text{Im} \left\{ \exp\left(\frac{2iJ_{\text{ex}} t}{\hbar}\right) \right\} \hat{\mathbf{y}} \right] \sum_{k, s} \delta(\epsilon(k) - sJ_{\text{ex}} - E).\end{aligned}\tag{D.3}$$

- Bloch, Felix (1 de jul. de 1929). “Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern”. En: *Zeitschrift für Physik* 52.7, págs. 555-600. ISSN: 0044-3328. DOI: [10.1007/BF01339455](https://doi.org/10.1007/BF01339455).
- Wallace, P. R. (mayo de 1947). “The Band Theory of Graphite”. En: *Physical Review* 71 (9), págs. 622-634. DOI: [10.1103/PhysRev.71.622](https://doi.org/10.1103/PhysRev.71.622).
- Greenwood, D A (abr. de 1958). “The Boltzmann Equation in the Theory of Electrical Conduction in Metals”. En: *Proceedings of the Physical Society* 71.4, págs. 585-596. DOI: [10.1088/0370-1328/71/4/306](https://doi.org/10.1088/0370-1328/71/4/306) (vid. pág. 12).
- DiVincenzo, D. P. y E. J. Mele (feb. de 1984). “Self-consistent effective-mass theory for intralayer screening in graphite intercalation compounds”. En: *Physical Review B* 29 (4), págs. 1685-1694. DOI: [10.1103/PhysRevB.29.1685](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.29.1685) (vid. pág. viii).
- Grosso, Giuseppe y Giuseppe Parravicini (2000). *Solid State Physics*. ISBN: 9780080481029.
- Gorbar, E. V., V. P. Gusynin et al. (jun. de 2002). “Magnetic field driven metal-insulator phase transition in planar systems”. En: *Physical Review B* 66 (4), pág. 045108. DOI: [10.1103/PhysRevB.66.045108](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.045108) (vid. pág. viii).
- Kopelevich, Y., J. H. S. Torres et al. (abr. de 2003). “Reentrant Metallic Behavior of Graphite in the Quantum Limit”. En: *Physical Review Letters* 90 (15), pág. 156402. DOI: [10.1103/PhysRevLett.90.156402](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.90.156402) (vid. pág. viii).
- Weiß, Alexander, Gerhard Wellein et al. (mar. de 2006). “The kernel polynomial method”. En: *Reviews of Modern Physics* 78.1 (1), págs. 275-306. ISSN: 1539-0756. DOI: [10.1103/RevModPhys.78.275](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.78.275) (vid. págs. 3, 13).
- Hassani, Sadri (2013). *Mathematical physics : a modern introduction to its foundations*. en. 2ª ed. Cham. ISBN: 9783319011950. DOI: [10.1007/978-3-319-01195-0](https://doi.org/10.1007/978-3-319-01195-0) (vid. págs. 4, 6).

Schaibley, John R., Hongyi Yu et al. (ago. de 2016). “Valleytronics in 2D materials”. En: *Nature Reviews Materials* 1.11. doi: [10.1038/natrevmats.2016.55](https://doi.org/10.1038/natrevmats.2016.55) (vid. pág. viii).

Garcia, Jose Hugo, Zheyong Fan et al. (18 de nov. de 2018). “Linear Scaling Quantum Transport Methodologies”. En: (vid. págs. viii, 8).