

INTERACCIÓN DE GRAFENO CON LUZ CON MOMENTO ANGULAR ORBITAL

MARÍA BELÉN FARIAS

Tesis de Licenciatura en Ciencias Físicas
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Universidad de Buenos Aires

Diciembre 2012



TEMA: Materia Condensada.

ALUMNA: María Belén Farias

LU N°: 135/08

LUGAR DE TRABAJO: Departamento de Física, UBA

DIRECTOR DEL TRABAJO: Dr. Pablo I. Tamborenea

CODIRECTOR DEL TRABAJO: Dr. Guillermo F. Quintero

FECHA DE INICIACIÓN: Abril de 2012

FECHA DE FINALIZACIÓN: Diciembre de 2012

FECHA DE EXAMEN: 20 de Diciembre de 2012

INFORME FINAL APROBADO POR:

Director

Jurado

Co-Director

Jurado

Profesora: Mirta A. Gil

Jurado

Alumna

Resumen

El grafeno es un material que puede considerarse bidimensional, compuesto por átomos de carbono organizados con una estructura de panal de abejas. Dada su baja dimensionalidad y particular estructura cristalina, el grafeno presenta un inusual comportamiento semi-metálico, y sus excitaciones de bajas energías se comportan como fermiones de Dirac no masivos. Por esta razón, sus propiedades ópticas son particulares: absorbe una cantidad de luz blanca muy alta para ser un material con un átomo de espesor. En este trabajo estudiamos teóricamente la interacción de luz con momento angular orbital (LMAO, o también llamada *twisted light*) con el grafeno. Para ello primeramente estudiamos algunas de las propiedades de los estados del grafeno, como el momento angular y el pseudoespín, y cómo se relacionan con la interacción con la luz. Luego escribimos el Hamiltoniano de interacción luz-electrón en el grafeno, utilizando la prescripción habitual que garantiza invariancia de gauge, y calculamos y analizamos los elementos de matriz correspondientes a estados de baja energía. Luego replanteamos el problema en el marco del formalismo de segunda cuantización, y escribimos las ecuaciones de Heisenberg para los operadores matriz densidad, y las resolvemos analíticamente para el régimen perturbativo. Con estos resultados estudiamos la dinámica de los electrones fotoexcitados, encontrando la evolución temporal de la transferencia de momento angular y de las corrientes inducidas.

Índice general

Resumen	3
1. Introducción	6
Bibliografía	10
2. Formalismo teórico	13
2.1. Modelo de enlaces fuertes o <i>tight-binding</i>	13
2.1.1. Formulación general	14
2.2. Segunda cuantización	17
2.2.1. Estados de Fock	18
2.2.2. Operadores Lineales y Bilineales	19
2.2.3. Hamiltoniano de <i>tight-binding</i>	21
2.2.4. Representación de Heisenberg y Ecuaciones de movimiento	23
2.3. Twisted Light	25
2.3.1. Generación de haces	26
2.3.2. Representación matemática	27
Bibliografía	28
3. Grafeno: modelo de enlaces fuertes	30
3.1. Estructura de bandas	30
3.2. Resolución en coordenadas polares	35
3.3. Pseudoespín, Momento Angular y Helicidad	39
Bibliografía	43

4. Interacción con luz con momento angular orbital	45
4.1. Hamiltoniano de interacción	45
4.2. Cálculo de elementos de matriz	48
4.3. Comportamiento de las integrales $I_{b,\nu}^{a,\nu'}(q, l)$	52
4.4. Planteo en segunda cuantización y ecuaciones de movimiento	59
4.5. Régimen de baja excitación	61
4.6. Dinámica de los electrones foto-excitados	66
4.6.1. Transferencia de momento angular	67
4.6.2. Contribución diamagnética al momento angular	69
4.6.3. Corrientes inducidas	71
Bibliografía	75
5. Conclusiones	77
Agradecimientos	81

Capítulo 1

Introducción

El carbono juega un rol único en la naturaleza. Su capacidad para formar redes complicadas lo convierten en una pieza fundamental de la química orgánica, y en la base de la existencia de la vida en su forma conocida. Incluso el carbono en su forma elemental muestra un comportamiento inusualmente complicado, formando un número de estructuras muy diferentes [1]. Además del diamante y el grafito conocidos desde la antigüedad, los nanotubos y los fulerenos, recientemente desarrollados, están en el foco de la atención de los físicos y los químicos. Es decir, hasta hace algunos años sólo estaban disponibles experimentalmente los alótropos tridimensionales (grafito), unidimensionales (nanotubos) y cero-dimensionales (fulerenos) (ver figura 1.1). El grafeno, la forma bidimensional del carbono (de red tipo panal de abejas), si bien ampliamente estudiado teóricamente, no estuvo accesible experimentalmente sino hasta 2004, cuando Novoselov y Geim [2] consiguieron aislarlo por primera vez y estudiar de forma sistemática varias de sus propiedades esenciales, ganando por ello el premio Nobel en 2010. El grafeno se relaciona con las formas del carbono de otras dimensionalidades mencionadas anteriormente (ver figura 1.1), puesto que el grafito consiste en capas de grafeno apiladas, y los nanotubos de carbono se obtienen enrollando el grafeno a lo largo de una dada dirección y reconectando las ligaduras del carbono, mientras que los fulerenos son moléculas que consisten de grafeno envuelto mediante la introducción de pentágonos en la red hexagonal.

Dada su baja dimensionalidad y particular estructura cristalina, el grafeno presenta un inusual comportamiento semi-metálico, y sus excitaciones de bajas energías se comportan como fermiones de Dirac no masivos. Por esta razón, sus propiedades ópticas son particulares:

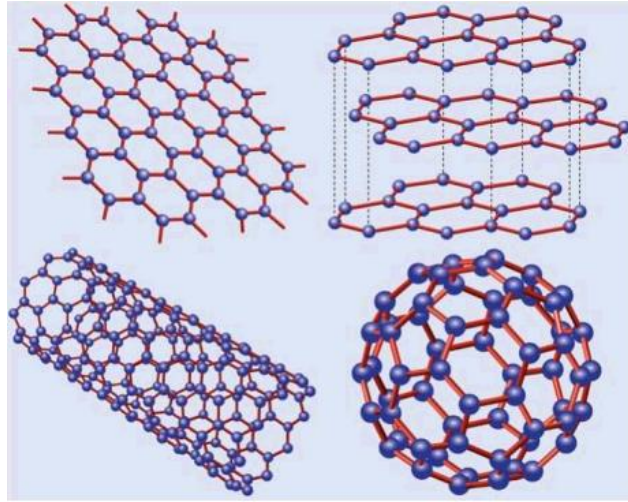


Figura 1.1: El grafeno (arriba a la izquierda) consiste en una red de panal de abejas de átomos de carbono. El grafito (arriba a la derecha) es un apilamiento de capas de grafeno. Los nanotubos de carbono (abajo a la izquierda) son cilindros de grafeno enrollados, y los fullerenos (C_{60} , abajo a la derecha) son moléculas que consisten de grafeno envuelto mediante la introducción de pentágonos en la red hexagonal.[2]

absorbe una cantidad de luz blanca muy alta para ser un material con un átomo de espesor, y esta cantidad está dada por una constante fundamental, la constante de estructura fina, que usualmente está asociada con fenómenos de electrodinámica cuántica y no de materia condensada [4, 5]. En el grafeno, los fermiones de Dirac se mueven a una velocidad 300 veces menor que la velocidad de la luz; por esta razón en el grafeno se muestran muchas de las propiedades inusuales de la electrodinámica cuántica (QED), pero a velocidades mucho más chicas. Algunos de estos efectos son el efecto Hall cuántico anómalo y el fenómeno de *zitterbewegung*, ambos medidos experimentalmente [2, 6]. Además, debido a que el grafeno comparte propiedades con las membranas suaves, es posible doblarlo y arrugarlo, de manera que los fermiones de Dirac se propaguen en un espacio localmente curvo, lo que da lugar a analogías con problemas de gravitación [7].

La descomposición de la radiación electromagnética en ondas planas es, sin lugar a dudas, la más familiar. Sin embargo, en esta representación idealizada, no es posible hablar de valores precisos para el momento angular orbital o incluso de espín [8] - el momento lineal es sí un buen número cuántico. Existen otras representaciones que pueden ser más útiles a

la hora de enfrentar determinados problemas; una de ellas permite referirse separadamente a momentos angulares de espín y orbital. Llamamos luz con torsión (en inglés *twisted light*) a la radiación electromagnética que puede caracterizarse usando esta representación. Por tanto, la característica más sobresaliente de la luz con torsión es su momento angular orbital, y por ello también se la conoce como **luz con momento angular orbital**.

Como su nombre lo sugiere, la *twisted light* presenta un frente de onda helicoidal (ver figura 1.2) que matemáticamente se introduce como una fase $e^{il\theta}$, con θ la dependencia azimutal? Este tipo de haces lleva un momento angular orbital independiente de su estado de polarización. Un único fotón de TL posee espín $\pm\hbar$ (polarización circular) y momento angular orbital $l\hbar$ [9]. Es importante destacar que, en la actualidad, existen técnicas precisas para modificar a voluntad el valor del momento angular orbital de un haz láser, incluyendo la utilización de pares de lentes cilíndricas y de hologramas generados computacionalmente [13, 14].

Recientemente, el estudio de la luz con momento angular orbital (LMAO) ha recibido renovada atención [9–12]. El interés por el tema se reavivó con el descubrimiento de métodos sencillos para producir *twisted light* en el laboratorio [13, 14]. Actualmente los esfuerzos en este campo se dirigen, por un lado, a entender y mejorar los haces de *twisted light* y por otro, a comprender la interacción de éstos con diversos sistemas materiales. La interacción entre la luz con torsión y la materia presenta interesantes particularidades. Bajo diferentes condiciones experimentales, el momento de espín, el orbital, o ambos es transferido a los grados de libertad internos y externos de la partícula en cuestión. Casi la totalidad del trabajo realizado en este último sentido se ha centrado en la interacción de LMAO con átomos y moléculas, mientras que poco se ha estudiado sobre la interacción con sólidos. En trabajos recientes se describe la interacción de LMAO con semiconductores masivos, sistemas bi-dimensionales y puntos cuánticos [15–17]. En estos trabajos se muestra que las transiciones ópticas interbanda en dichos sistemas presentan reglas de selección inusuales, que habilitan nuevos tipos de transiciones. Como punto a destacar, se encuentra que las poblaciones de electrones foto-excitados por LMAO generan corrientes eléctricas dentro del material con patrones diversos según el valor del momento angular portado por la luz. Se ha mostrado que estas corrientes pueden generar campos magnéticos ultra-rápidos, los cuales podrían tener aplicaciones en computación cuántica y espintrónica.

En los últimos años se ha estudiado teóricamente la interacción de luz con grafeno me-

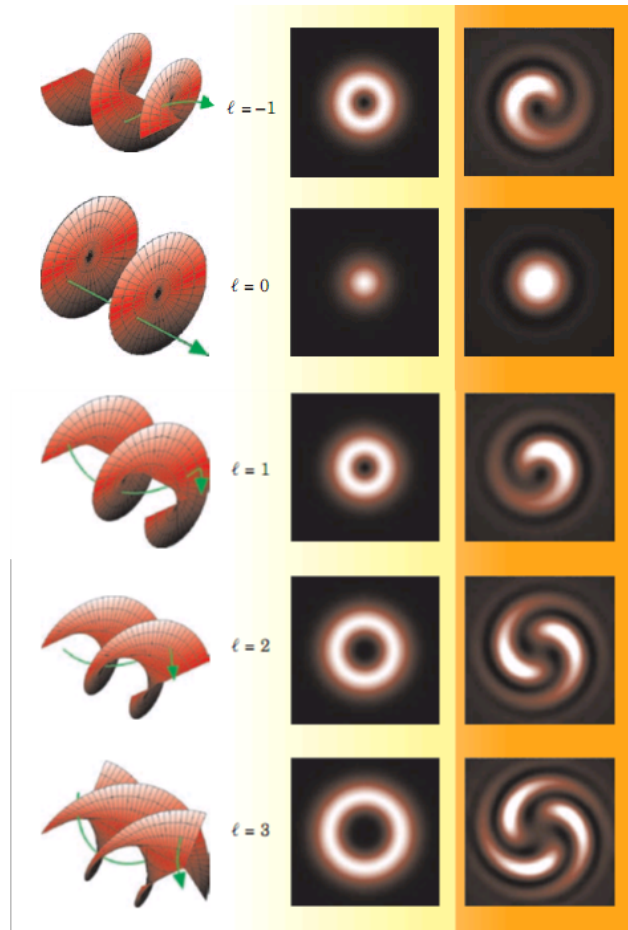


Figura 1.2: El momento angular orbital de un haz de luz, a diferencia del momento angular de espín, es independiente de la polarización del haz. Surge de frentes de fase constante helicoidales (columna izquierda) en los que el vector de Poynting (flechas verdes) ya no es paralelo al eje del haz. Este tipo de haces por sí solos tiene un sencillo perfil de densidad anular (columna del centro), pero cuando interfieren con una onda plana producen un complicado patrón de intensidades en espiral (columna derecha). [9]

diante diferentes formalismos y con diferentes enfoques, como por ejemplo el cálculo de la opacidad o de la conductividad óptica y el control de fotocorrientes, entre otros [5, 7, 18]. El estudio de la interacción del grafeno con luz que lleva momento angular orbital tiene puntos de interés desde el planteo, pues da lugar a preguntas sobre temas que raramente se mencionan en los trabajos en los que se estudian las propiedades ópticas del grafeno. Al tener la luz momento angular orbital, se espera que haya una transferencia de momento angular de los

fotones de la luz a los electrones del grafeno. Sin embargo, al tratarse de fermiones de Dirac, es esperable que el momento angular orbital de los electrones no esté bien definido [20], y eso es cierto aunque su espín no esté teniéndose en cuenta, como se verá en los capítulos siguientes. De esta manera surge la pregunta de si existe otro momento angular asociado a estos estados, de manera que el momento angular total se conserve. Se encuentra que de hecho este momento angular existe, y está asociado con la forma de la red. Si bien esta variable, llamada *pseudoespín*, es ampliamente discutida en la literatura sobre grafeno [21], no se le ha dado gran importancia en los trabajos que estudian la interacción con luz.

Esta tesis está organizada de la siguiente manera. En el capítulo 2 se presenta el formalismo teórico necesario para el desarrollo de los temas a estudiar: se repasa el modelo de enlaces fuertes en sólidos en la sección, se introduce brevemente el formalismo de segunda cuantización y se estudia con mayor detalle la luz con momento angular orbital. En el capítulo 3 se estudian las propiedades de los estados del grafeno: la estructura de bandas en el modelo de *tight-binding* y la forma y propiedades de sus excitaciones de baja energía, en coordenadas cartesianas y polares. Por último, en el capítulo 4 se estudia la interacción de los estados del grafeno con luz con momento angular orbital utilizando un Hamiltoniano de *minimal coupling*, y en el capítulo 5 se presentan las conclusiones del trabajo.

Bibliografía

- [1] M. I. Katsnelson, *Materials Today* **10** (2007)
- [2] Novoselov, K. S., A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, and A. A. Firsov, *Nature* **306**, 666 (2004).
- [3] Castro Neto A. H., F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [4] Kuzmenko A., E. van Heumen, F. Carbone, D. van der Marel, *Phys. Rev. Lett.* **100** (2008).
- [5] Nair E., Blake P., Grigorenko A., Novoselov K., Booth T., Stauber T., Peres N., Geim A., *Science* **320**, 308 (2008).
- [6] Novoselov, K. S., A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, and A. A. Firsov, *Nature* **438**, 197 (2005).
- [7] Fauser, B., J. Tolksdorf, and E. Zeidler, *Quantum Gravity*, Birkhäuser (2007).
- [8] S. J. Van Enk and G. Nienhuis, *Journal of Modern Optics*, **41**, 5 (1994)
- [9] M. Padgett, J. Courtial, and L. Allen, *Physics Today* p.35, (2004)
- [10] L. Allen, M. J. Padgett, and M. Babiker, *Progress in Optics*, volume XXXIX, **291** (1999).
- [11] G. Molina-Terriza, J. P. Torres, and L. Torner, *Nature Physics* **3**, 305 (2007).
- [12] David L. Andrews *Structured Light and Its Applications: An Introduction to Phase-Structured Beams and Nanoscale Optical Forces*, 1st ed. (Academic Press, 2008).

-
- [13] V. Yu. Bazhenov, M. V. Vasnetsov, and M. S. Soskin, JETP Lett. **52**, 429 (1990).
- [14] L. Allen, M. W. Beijersbergen, R. J. C. Spreeuw, and J. P. Woerdman, Phys. Rev. A **45**, 8185 (1992).
- [15] G. F. Quinteiro and P. I. Tamborenea, EPL **85**, 47001 (2009). EPL Editor's Choice.
- [16] G. F. Quinteiro and P. I. Tamborenea, Phys. Rev. B **79**, 155450 (2009).
- [17] G. F. Quinteiro and P. I. Tamborenea, Phys. Rev. B **82**, 125207 (2010).
- [18] M. Mecklenburg, J. Woo and B. C. Regan, Phys. Rev. B **81**, 245401 (2010).
- [19] E.J. Mele, Petr Kral and D. Tomanek, Phys. Rev. B **61**, 7669 (2000).
- [20] F. Halzen, A. Martin, *Quarks and Leptons: An introductory course in modern particle physics*, (Wiley, 1984).
- [21] M. Mecklenburg and B. C. Regan, Phys. Rev. Lett. **106**, 116803 (2011).

Capítulo 2

Formalismo teórico

2.1. Modelo de enlaces fuertes o *tight-binding*

El modelo más sencillo para describir un sólido fue propuesto por Arnold Sommerfeld en 1927: consideraba un metal como un gas de electrones libres, descritos por la mecánica cuántica; aplicando la estadística de Fermi-Dirac al modelo de Drude. Si se quiere mejorar un poco este modelo, se puede considerar que los electrones están casi libres, sólo perturbados débilmente por los iones de la red. En este caso se consideran funciones de onda descritas por funciones de Bloch en lugar de ondas planas. Sin embargo, muchas veces estos modelos resultan ser una mala aproximación del comportamiento de un electrón en sólidos. En muchos sólidos los electrones están localizados en los sitios atómicos, y ocasionalmente saltan a sitios vecinos. En la figura 2.1 se muestran ls orbitales $1s$, $2s$, $2p$ y $3s$ para dos átomos de sodio vecinos en una red cúbica centrada en el cuerpo, separados aproximadamente por $3,7 \text{ \AA}$, que es la distancia entre primeros vecinos en el sodio metálico.

Como puede observarse, el *overlap* entre los orbitales $1s$ es prácticamente despreciable, mostrando que estos orbitales permanecen inalterados en el estado metálico. La superposición entre niveles $2s$ y $2p$ es muy pequeña, y podría esperarse que los niveles en el metal estén muy relacionados con los niveles atómicos. Sin embargo, el *overlap* de los niveles $3s$, que contienen a los electrones de valencia atómicos, es sustancial, y no hay ninguna razón para esperar que los niveles electrónicos reales en el metal se parezcan a estos niveles atómicos. El *modelo de enlaces fuertes* o de *tight-binding* [1] estudia el caso en el que el *overlap* de las funciones atómicas es suficientemente grande como para requerir correcciones al caso

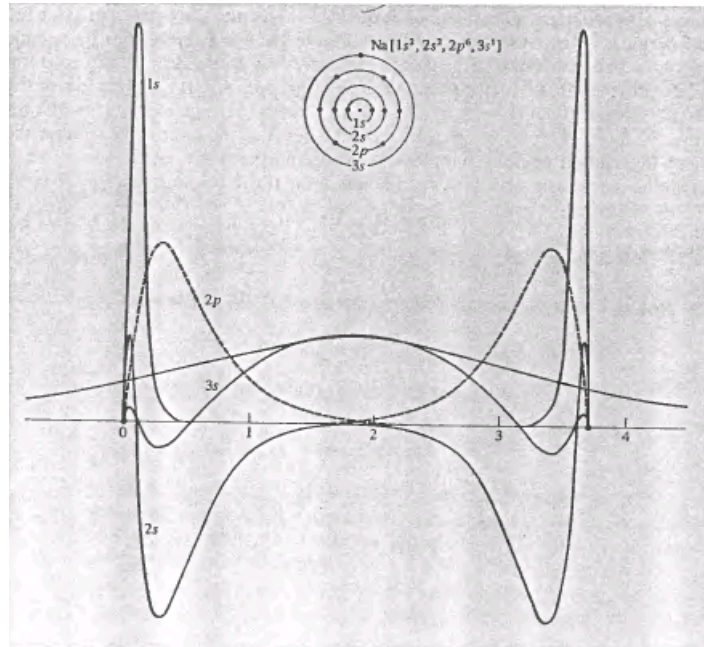


Figura 2.1: Funciones de onda calculadas para el sodio atómico, graficadas alrededor de dos núcleos separados por la distancia entre primeros vecinos del sodio atómico, $3,7\text{\AA}$. [1]

de átomos aislados, pero no tan grande como para que la descripción atómica se vuelva completamente irrelevante. Esta descripción es particularmente útil para describir las bandas de energía de los metales de transición, semiconductores o aislantes.

2.1.1. Formulación general

Considero orbitales atómicos ψ_n localizados, es decir, que cumplan que:

$$H_{at}\psi_n = E_n\psi_n$$

donde H_{at} es el Hamiltoniano de un átomo ubicado en un punto de la red, y ψ_n es un nivel ligado de H_{at} que cumple que $\psi_n(\mathbf{r})$ es muy chica cuando r supera distancias del orden de la constante de red (rango de ψ_n).

Al desarrollar la aproximación de *tight-binding*, consideramos en una primera instancia que el Hamiltoniano del sólido puede aproximarse por H_{at} en las cercanías de cada punto de la red, y que sólo comienza a diferenciarse de éste para distancias del punto de la red

en cuestión mayores que el rango de ψ_n . Entonces, $\psi_n(\mathbf{r})$ es una excelente aproximación a la función de onda de un estado estacionario para el Hamiltoniano completo, y también lo serán todas las funciones de onda $\psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ para cualquier \mathbf{R} en la red de Bravais, pues H tiene la periodicidad de la red. Para calcular las correcciones a este caso extremo, podemos escribir el Hamiltoniano del cristal como:

$$H = H_{at} + \Delta U(\mathbf{r})$$

donde $\Delta U(\mathbf{r})$ contiene todas las correcciones al potencial atómico necesarias para producir el potencial periódico completo del cristal. Si ΔU se anula siempre que ψ_n no se anula, cada nivel atómico $\psi_n(\mathbf{r})$ va a resultar en N niveles en el potencial periódico, con la misma energía E_n , y funciones de onda $\psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})$, para cada uno de los N sitios \mathbf{R} en la red. Entonces, deben encontrarse combinaciones lineales de estas funciones de onda degeneradas que cumplan la condición de Bloch:

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}). \quad (2.1)$$

La combinación lineal requerida es:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \quad (2.2)$$

donde \mathbf{k} varía entre los N valores en la primera zona de Brillouin consistentes con condiciones periódicas de contorno de Born-von Karman. Estos estados satisfacen la condición de Bloch (2.1) con vector de onda \mathbf{k} , mientras que continúan mostrando el carácter atómico de los niveles.

Ahora bien, en un caso más realista, $\psi_n(\mathbf{k})$ se vuelve chico, pero no necesariamente cero, antes de que $\Delta U(\mathbf{r})$ se vuelva apreciable. Entonces, uno buscaría una solución que retenga la misma forma:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}),$$

pero donde $\phi(\mathbf{r})$ no sea necesariamente una función atómica exacta, sino alguna función de onda determinada mediante futuros cálculos, que pueda expandirse en un número mediana-

mente chico de orbitales atómicos:

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_n b_n \psi_n(\mathbf{r}).$$

Considero entonces la ecuación de Schrödinger para el cristal:

$$H\psi(\mathbf{r}) = [H_{at} + \Delta U(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{k})\psi(\mathbf{r}),$$

la multiplico por $\psi_m(\mathbf{r})^*$ e integro en todo \mathbf{r} , y uso que $H_{at}\psi_m = E_m$, para encontrar que:

$$[\varepsilon(\mathbf{k}) - E_m] \int \psi_m^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \int \psi_m^*(\mathbf{r})\Delta U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})d\mathbf{r}$$

Luego, utilizando la forma general de los estados $\psi(\mathbf{r})$ y las relaciones de ortonormalidad para las funciones de onda atómicas, se llega a una ecuación de autovalores que determina los coeficientes $b_n(\mathbf{k})$ y las energías de Bloch $\varepsilon(\mathbf{k})$:

$$\begin{aligned} [\varepsilon(\mathbf{k}) - E_m]b_m &= -[\varepsilon(\mathbf{k}) - E_m] \sum_n \left(\sum_{\mathbf{R} \neq 0} \int \psi_m^*(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}d\mathbf{r} \right) b_n \quad (2.3) \\ &+ \sum_n \left(\int \psi_m^*(\mathbf{r})\Delta U(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r})d\mathbf{r} \right) b_n \\ &+ \sum_n \left(\sum_{\mathbf{R} \neq 0} \int \psi_m^*(\mathbf{r})\Delta U(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}d\mathbf{r} \right) b_n, \end{aligned}$$

donde todas las integrales que aparecen a la derecha son pequeñas, bajo la suposición de orbitales atómicos bien localizados, y que las funciones de onda atómicas se vuelven pequeñas a las distancias suficientemente grandes como para que el potencial periódico se diferencie del atómico. En los próximos capítulos despreciaremos la integral de *overlap* (contenidas en el primer término a la derecha de la ecuación (2.3):

$$\alpha = \int \psi_m^*(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})d\mathbf{r} \approx 0.$$

Para facilitar la notación, llamamos:

$$\beta_{m,n} = - \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r}),$$

que es la **integral de campo cristalino** para $m = n$, y la **integral de salto** dentro de un mismo sitio de la red de Bravais para $m \neq n$. Definimos además la **integral de salto** entre distintos sitios de la red separados por un vector de la red \mathbf{R} como:

$$\gamma_{m,n}(\mathbf{R}) = - \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}).$$

Con esta notación, obtenemos la expresión para el sistema de autovalores en el modelo de *tight-binding*:

$$[\varepsilon(\mathbf{k}) - E_m] b_m + \sum_n \left(\beta_{m,n} + \sum_{\mathbf{R} \neq 0} \gamma_{m,n}(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \right) b_n = 0. \quad (2.4)$$

Es pertinente recordar que el modelo de enlaces fuertes hasta aquí desarrollado **sólo es válido para redes de Bravais**. En caso de tener una red de Bravais con base, una forma de solucionar este problema es considerar a los distintos átomos dentro de un sitio de la red como si fueran diferentes orbitales atómicos, centrados en cada punto de la base. Es decir, uno considera una combinación lineal de niveles atómicos centrados en la red de Bravais y en los puntos de la base, por ejemplo, para una base de dos elementos separados en \mathbf{d} :

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} [a\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}) + b\phi(\mathbf{r} - \mathbf{d} - \mathbf{R})]. \quad (2.5)$$

2.2. Segunda cuantización

Los sistemas de muchos cuerpos con interacciones conducen a Hamiltonianos que son muy difíciles de resolver en forma exacta, y muchas veces también resulta difícil hallar una solución aproximada. A la hora de enfrentarse al estudio de sistemas de muchos cuerpos es muy útil trabajar en el formalismo de segunda cuantización [2]. En esta representación, la introducción de operadores de creación y destrucción de partículas hace que los operadores tomen una forma más simple. Además, es posible describir a cualquier sistema con un número arbitrario

de partículas mediante estados de Fock, que resultan prácticos al momento de estudiar un sistema con un número de partículas muy grande.

2.2.1. Estados de Fock

Para introducir este formalismo supongamos que se tiene un sistema de N partículas idénticas no interactuantes, descrito por el siguiente Hamiltoniano en primera cuantización

$$H(\vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N) = \sum_{j=1}^N H_0(\vec{\nabla}_j, \vec{x}_j), \quad (2.6)$$

donde H_0 es el Hamiltoniano de cada partícula. Supongamos también una base ortonormal $\{\phi_i\}$ de estados de una partícula, con la cual se puede escribir la función de onda total del sistema. Es preciso notar que el estado total del sistema es completamente antisimétrico (simétrico) para el caso de fermiones (bosones). Entonces, la función de onda del sistema es una combinación con simetría definida de productos directos de los estados de una partícula que estén ocupados.

Ahora bien, en forma análoga al problema del oscilador armónico cuántico, se pueden definir operadores de creación a_i^\dagger y aniquilación a_i , que crean y destruyen una partícula en el estado i respectivamente. Ambos están definidos respecto al estado de vacío $|0\rangle_i$, de manera tal que (durante este capítulo omitiremos los tildes sobre los operadores a menos que el contexto presente alguna ambigüedad):

$$|\phi_i\rangle = a_i^\dagger |0\rangle_i, \quad a_i |0\rangle_i = 0. \quad (2.7)$$

El operador número de ocupación de los orbitales o spin-orbitales ϕ_i se define como:

$$n_i = a_i^\dagger a_i. \quad (2.8)$$

A partir de las definiciones anteriores se puede utilizar otra notación en la que los estados están etiquetados por números de ocupación n_i de los estados de una partícula. Esta notación

es la de la segunda cuantización, y los estados del sistema quedan definidos como:

$$|n_1, n_2, \dots\rangle \equiv P^\eta \prod_{l=1}^{n_1} \phi_1(r_l) \prod_{l=n_1+1}^{n_1+n_2} \phi_2(r_l) \dots = \prod_i \frac{(a_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} |0\rangle_i, \quad (2.9)$$

donde el operador P^η simetriza ($\eta = 1$ para bosones) o antisimetriza ($\eta = -1$ para fermiones) la función que está a su derecha respecto a la permutación de cualquier par de coordenadas.

Los estados $|n_1, n_2, \dots\rangle$ son llamados estados de Fock y forman un espacio de Hilbert que contiene cualquier estado físico con un número arbitrario de partículas (espacio de Fock). En la notación de segunda cuantización, la condición de simetría o antisimetría de los estados se traduce en relaciones de conmutación entre operadores de creación y destrucción para bosones y anticonmutación para fermiones:

$$\begin{aligned} [a_i, a_j^\dagger]_\eta &= a_i a_j^\dagger - \eta a_j^\dagger a_i = \delta_{i,j} \\ [a_i, a_j]_\eta &= [a_i^\dagger, a_j^\dagger]_\eta = 0 \end{aligned} \quad (2.10)$$

donde η es $+$ ($-$) para operadores bosónicos (fermiónicos), y $[,]_+$ ($[,]_-$) es el conmutador (anticonmutador) entre los dos operadores.

2.2.2. Operadores Lineales y Bilineales

En segunda cuantización los operadores se escriben en términos de operadores de creación y destrucción. Los operadores lineales \mathbf{v}^\dagger tienen asociado un vector \mathbf{v} de componentes v_i de manera que:

$$\mathbf{v}^\dagger = \sum_i v_i a_i^\dagger.$$

En cambio, todo operador bilineal \mathbf{A} tiene una matriz asociada de elementos A_{ij} de forma que:

$$\mathbf{A}^\dagger = \sum_{i,j} a_i^\dagger A_{ij} a_j.$$

Un ejemplo de operador lineal es el operador de campo ψ^\dagger , que es una combinación de los operadores de creación de los distintos estados de la base de una partícula:

$$\psi^\dagger(\mathbf{r}, t) = \sum_i \phi_i(\mathbf{r}) a_i^\dagger(t). \quad (2.11)$$

Este operador, aplicado al estado de vacío, crea una partícula en la posición \mathbf{r} a tiempo t . Otro punto interesante, es que se puede definir también el **operador densidad** a partir del operador de campo, cuya integral en el espacio es el operador número de partículas,

$$\rho(\mathbf{r}) = \psi^\dagger(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \sum_{i,j} a_i^\dagger a_j \phi_i^*(\mathbf{r})\phi_j(\mathbf{r}), \quad (2.12)$$

$$N = \int d^3r \rho(\mathbf{r}) = \sum_i a_i^\dagger a_i. \quad (2.13)$$

Al igual que los operadores de creación y destrucción, el operador de campo también cumple con relaciones de conmutación para bosones y de anticonmutación para fermiones. Las mismas pueden ser deducidas a partir de las relaciones de (??), y para el caso fermiónico se obtiene:

$$\begin{aligned} \{\psi(\mathbf{r}, t), \psi(\mathbf{r}', t)\} &= 0 \\ \{\psi^\dagger(\mathbf{r}, t), \psi^\dagger(\mathbf{r}', t)\} &= 0 \\ \{\psi(\mathbf{r}, t), \psi^\dagger(\mathbf{r}', t)\} &= \sum_{i,j} \{a_i(t), a_j^\dagger(t)\} \phi_i(\mathbf{r})\phi_j(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \end{aligned} \quad (2.14)$$

donde $\{, \} \equiv [,]_-$ es el anticonmutador entre los dos operadores, definido en la ecuación (2.10). Al comienzo de esta sección se definieron los operadores bilineales, y un ejemplo de ellos son los operadores de una partícula. Podemos considerar, por ejemplo, un Hamiltoniano de una partícula en presencia de un potencial externo $U(\mathbf{r})$:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}). \quad (2.15)$$

Para escribir el Hamiltoniano en segunda cuantización se debe hacer la siguiente integral espacial de la densidad Hamiltoniana,

$$H = \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}) H_0 \psi(\mathbf{r}) = \sum_{i,j} a_i^\dagger a_j H_{ij}, \quad (2.16)$$

con $H_{i,j} = \int d^3r \phi_i^\dagger(\mathbf{r}) H_0 \phi_j(\mathbf{r})$. Este mismo procedimiento puede aplicarse para cualquier operador bilineal, resultando en un *operador de un cuerpo* en segunda cuantización:

$$O = \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}) O \psi(\mathbf{r}) = \sum_{i,j} a_i^\dagger a_j O_{ij}. \quad (2.17)$$

En caso que se consideren interacciones entre partículas, el Hamiltoniano ya no va a ser solamente bilineal, sino que aparecen términos de la forma $\psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r})$ ó $a_i^\dagger a_m^\dagger a_j a_l$. Este tipo de Hamiltonianos corresponde a un *operador de dos cuerpos*.

2.2.3. Hamiltoniano de *tight-binding*

En este modelo, estudiado en la sección 2.1, los electrones están localizados en sitios atómicos y sólo ocasionalmente saltan de un sitio a otro sitio vecino. El Hamiltoniano adquiere una forma simple, que es bilineal en los operadores de creación y destrucción:

$$H = \sum_{i,\sigma,\delta} W_\delta a_{i,\sigma}^\dagger a_{i+\delta,\sigma}. \quad (2.18)$$

El índice i denota el sitio que corresponde al punto \mathbf{R}_i , σ es el índice de espín, e $i+\delta$ representa a los átomos vecinos más cercanos. Es decir, cada término del Hamiltoniano destruye un electrón en un sitio de la red y lo crea en algún sitio vecino. El coeficiente W_δ es el elemento de matriz del Hamiltoniano entre el orbital localizado en el sitio R_i y el que está centrado en $R_{i+\delta}$, es decir, se corresponde con la **integral de salto** definida en la sección 2.1 si $\delta \neq 0$:

$$W_\delta = \int d^3r \phi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) [H_{at} + \Delta U(\mathbf{r})] \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{i+\delta}), \quad (2.19)$$

donde H_{at} es el Hamiltoniano atómico de los átomos que forman el sólido, y $\Delta U(\mathbf{r})$ contiene todas las correcciones al potencial atómico requeridas para generar el potencial periódico del

crystal. Este coeficiente usualmente se considera no nulo sólo cuando δ corresponden a los primeros vecinos, pero a veces se consideran interacciones a segundos o incluso a terceros vecinos. Para el caso $\delta = 0$, W_0 es la energía del sitio i .

Por otra parte, se puede pasar del Hamiltoniano de (2.18) a uno que sea bilineal en los operadores de creación y destrucción en el espacio de vectores de onda \mathbf{k} . Para ello, uno puede definir los operadores en el espacio k de la forma habitual:

$$\begin{aligned} a_{j\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} a_{\mathbf{k},\sigma} \\ a_{\mathbf{k}\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} a_{j,\sigma}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

donde \mathbf{R}_j corre a través de los N sitios de la red de Bravais, y \mathbf{k} es cualquier vector de onda en la primera zona del Brillouin que cumpla con las condiciones de contorno periódicas de Born - von Karman [1].

Si los $a_{j,\sigma}$ son operadores fermiónicos, entonces también lo son los operadores $a_{\mathbf{k},\sigma}$. Por lo tanto, cumplen con las relaciones de anticonmutación usuales $\{a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, a_{\mathbf{k}'\sigma'}\} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$.

Por último, para obtener la forma del Hamiltoniano en el espacio de vectores de onda es necesario también utilizar una identidad que está relacionada con el análisis de Fourier en sistemas periódicos [1].

$$\sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} = N\delta_{\mathbf{k},0}.$$

A partir de la identidad anterior y de las definiciones de (2.20), el Hamiltoniano se puede reescribir como:

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} W(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (2.21)$$

donde la energía $W(\mathbf{k})$ es:

$$W(\mathbf{k}) = \sum_{\delta} W_{\delta} e^{i\mathbf{k}\cdot\delta}. \quad (2.22)$$

A diferencia de (2.18), el Hamiltoniano en el espacio \mathbf{k} adquiere una forma diagonal.

2.2.4. Representación de Heisenberg y Ecuaciones de movimiento

Los observables de un sistema cuántico están caracterizados por operadores en un espacio de Hilbert [3]. Estos operadores en sí mismos **no representan cantidades medibles**, uno puede únicamente medir el valor de expectación de estos operadores o el módulo cuadrado de las amplitudes de transición:

$$\langle \psi | \hat{O} | \phi \rangle$$

Entonces, si tomamos cualquier operador $\hat{A}(t)$ que sea unitario para un tiempo fijo ($\hat{A}^\dagger(t)\hat{A}(t) = 1 = \hat{A}(t)\hat{A}^\dagger(t)$), vale que:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{O} | \phi \rangle &= \langle \psi | \hat{A}^\dagger(t)\hat{A}(t)\hat{O}\hat{A}^\dagger(t)\hat{A}(t) | \phi \rangle \\ &= \langle \hat{A}(t)\psi | \hat{A}(t)\hat{O}\hat{A}^\dagger(t) | A(t)\phi \rangle. \end{aligned}$$

Entonces, si uno transforma consistentemente *todas* las funciones de onda y *todos* los operadores, las magnitudes medibles no cambian. La forma de transformar los operadores y las funciones de onda es:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle_A &\equiv \hat{A}(t) |\psi\rangle \\ \hat{O}_A(t) &\equiv \hat{A}(t)\hat{O}\hat{A}^\dagger(t), \end{aligned}$$

y con ello todas las magnitudes medibles permanecen sin cambios:

$$\langle \psi | \hat{O} | \phi \rangle = \langle \psi |_A \hat{O}_A | \phi \rangle_A. \quad (2.23)$$

Este tipo de transformación se llama *transformación de representación* o de *picture*, y cada operador unitario dependiente del tiempo define una representación particular. En la **representación de Schrödinger** $\hat{A}_S(t) \equiv \mathbb{I}$, las funciones de onda y los operadores tienen su dependencia temporal “natural”. En este trabajo utilizaremos la **representación de Heisenberg**. En ella, $\hat{A}_H(t) = \hat{U}_S(t_0, t)$, donde \hat{U} es el operador de evolución temporal en la representación de Schrödinger (para más detalle ver la referencia [3]). En esta representación:

- Los estados son independientes del tiempo.

- Los operadores tienen una dependencia en el tiempo de la forma

$$\hat{O}(t) = e^{(i/\hbar)Ht} \hat{O}(0) e^{(-i/\hbar)Ht}.$$

En este caso, la dinámica del problema está contenida en la ecuación de movimiento que cumplen los operadores, la **ecuación de Heisenberg**:

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{O}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{O}(t)]. \quad (2.24)$$

Recordando la expresión para operadores bilineales en segunda cuantización, expresados en una determinada base, dada por la ecuación (2.17), podemos observar que la evolución temporal de cualquier operador estará determinada por la del operador **matriz densidad**:

$$\hat{\rho}_{i,j}(t) = \hat{a}_i^\dagger(t) \hat{a}_j(t), \quad (2.25)$$

donde i y j representan cualquier conjunto de números cuánticos que etiqueten al estado. Entonces, la dinámica de las cualquier cantidad observable estará determinada por el operador matriz densidad. En particular, para observables asociados con operadores de un cuerpo (operadores bilineales), la dinámica estará dada por el **valor medio** (tomado sobre un estado inicial constante ya que estamos en la representación de Heisenberg) de la matriz densidad:

$$\rho_{i,j}(t) = \langle \phi_0 | \hat{\rho}_{i,j}(t) | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | \hat{a}_i^\dagger(t) \hat{a}_j(t) | \phi_0 \rangle.$$

Esto es válido debido a que los operadores de un cuerpo pueden escribirse como combinaciones lineales de matrices densidad, como ya se mencionó. Para operadores de dos cuerpos no alcanza con tomar el valor medio de la matriz densidad y es necesario generalizar este concepto. En este trabajo, sin embargo, no tendremos en cuenta las interacciones entre electrones, por lo que nos alcanza con trabajar con operadores de un cuerpo y por lo tanto con el valor medio de la matriz densidad.

2.3. Twisted Light

En 1909, John Henry Poynting descubrió que la luz posee momento angular: momento angular interno o de espín, asociado con la polarización circular. Para un fotón, tiene un valor de $\pm\hbar$ [4]. En 1992 Allen *et al.* encontraron que la luz con una fase con dependencia acimutal, de la forma $\exp(il\phi)$ lleva momento angular **independientemente de su estado de polarización** [5]. Ellos predijeron que cada fotón tendría un momento angular orbital $l\hbar$.

Una característica de los haces con fases helicoidales es que la fase no está bien definida en el eje del haz. Esta singularidad impone que la amplitud del haz sea nula en el eje, de manera que la intensidad de la sección transversal de cualquiera de este tipo de haces tendrá forma anular, no importa qué tanto se enfoque el haz, formando **vórtices ópticos** [6]. Estos vórtices son el análogo óptico a las líneas nodales en los experimentos de Chladni, en los que se cubre de arena placas metálicas vibrantes, y la misma se acumula en las líneas nodales. De esta misma manera, átomos en un haz se acumularían en las líneas de vórtices [7]. Es importante notar que los vórtices en sí mismos, por tratarse de posiciones con intensidad óptica nula, no llevan momento lineal ni momento angular. El momento angular se asocia con la rotación de la estructura de la fase del campo alrededor del vórtice.

El momento angular orbital (\mathbf{L}) no está relacionado directamente con el estado de polarización de la luz (\mathbf{S}). Las componentes de \mathbf{L} y \mathbf{S} a lo largo de la dirección de propagación del haz pueden ser observadas separadamente midiendo el cambio en el momento angular de la materia después de interactuar con la luz [8]. Por ejemplo, Beth [9] midió el torque ejercido en una placa birrefringente cuando transforma luz circularmente polarizada a derecha en luz circularmente polarizada a izquierda, y eso se interpreta como una medición del momento angular de espín en la dirección z . Por otra parte, un modo de Hermite-Gauss de un láser monocromático se transforma en un modo de Laguerre-Gauss al pasar por dos lentes cilíndricas. El primer tipo de modo no posee momento angular orbital, mientras que el haz transformado tiene una dependencia acimutal $\exp(il\phi)$, de modo que debe ejercerse un torque sobre el sistema de lentes, y puede medirse. Durante este proceso la polarización de la luz y por lo tanto su S_z **no cambian**. Estos hechos pueden observarse en la figura 2.2.

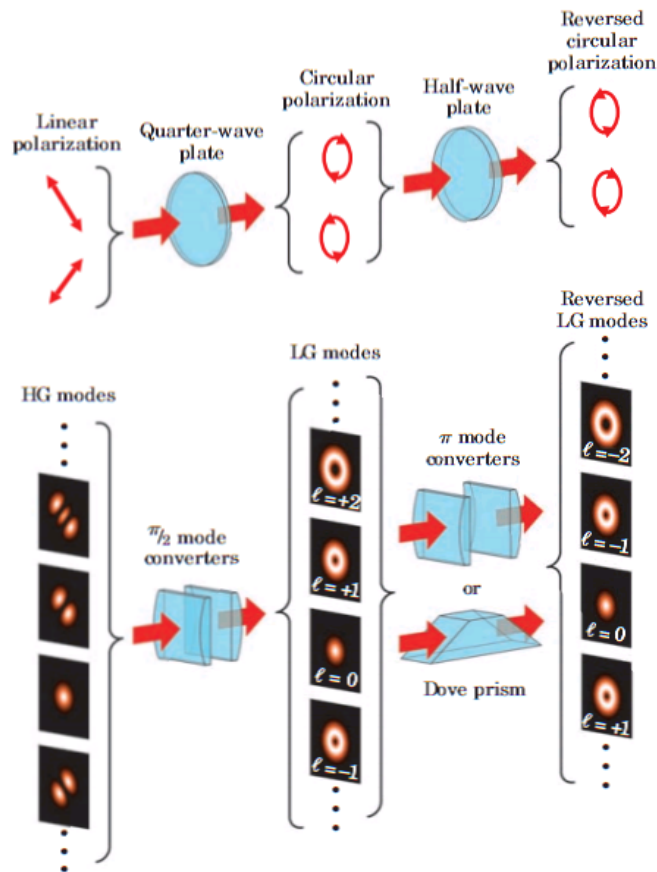


Figura 2.2: Analogía entre la forma en la que una placa de cuarto de onda o de media onda cambia el estado de polarización de la luz, es decir, su momento angular de espín (arriba) y la forma en la que un sistema de lentes cilíndricas cambia el momento angular de la luz. [4]

2.3.1. Generación de haces

Además de la técnica con lentes cilíndricas mencionado anteriormente, existen otros métodos para generar luz con momento angular orbital. Al pensar en querer imprimir la estructura de fase $\exp(il\phi)$ a la luz, quizá el método más obvio consista en introducir un camino óptico que varíe acimutalmente haciendo pasar la luz por un dieléctrico cuyo grosor varíe acimutalmente [7]. Este tipo de dispositivo es conocido como una placa de fase en espiral (SPP por sus siglas en inglés), y se muestra en la figura 2.3 (a). Otro método para imprimir la estructura de fase correcta es la utilización de hologramas de un SPP generados computacio-

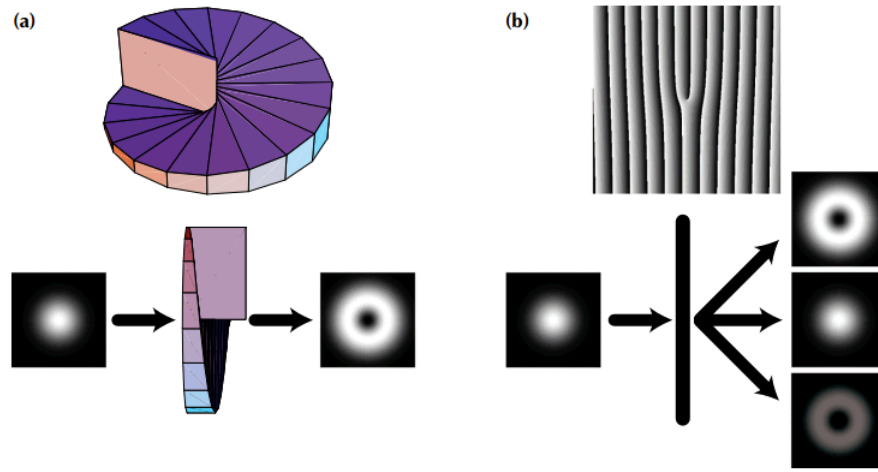


Figura 2.3: Dos métodos para producir luz con momento angular orbital. (a) Un SPP (*spiral phase plate*, arriba)- un material dieléctrico con grosor que varía acimutalmente - puede introducir un término en la fase de forma $l\phi$ mediante diferencia de caminos. Un SPP transforma un haz gaussiano en uno con un vórtice central (abajo). (b) Un holograma también introduce una fase de esa forma. Se agrega una red de difracción, el holograma en fase de una cuña, que separa el haz en distintos órdenes de difracción (abajo). [7]

nalmente (figura 2.3 (b)). Estos hologramas pueden formarse grabando en papel fotográfico el patrón de interferencia entre una onda plana y el haz que uno busca producir. Iluminar el holograma resultante con otra onda plana produce un haz de primer orden de difracción con la intensidad y el patrón de fases deseado. Para sacar máxima ventaja de este método, se utilizan moduladores espaciales de luz de alta calidad. Estos dispositivos de cristal líquido pixelado toman el lugar del papel fotográfico, y permiten modificar en tiempo real los patrones holográficos mediante una computadora, y de esta manera modificar en tiempo real los modos de luz con momento angular creados. Además, estos dispositivos permiten alcanzar valores muy altos de OAM (100 o más) manteniendo la calidad del haz.

2.3.2. Representación matemática

Para un haz de *twisted light* es posible escribir el potencial vector en el gauge de Coulomb. La forma más general para un haz que se propaga en la dirección \hat{z} , en la aproximación

paraxial, es la siguiente:

$$A(\mathbf{r}, t) = A_0 e^{i(kz - \omega t)} [\boldsymbol{\epsilon}_\pm F(\mathbf{r}) + \boldsymbol{\epsilon}_z G(\mathbf{r})] + c.c. \quad (2.26)$$

donde $\boldsymbol{\epsilon}_\pm = \hat{x} \pm i\hat{y}$ es la polarización transversal y $\boldsymbol{\epsilon} = \hat{z}$ es la polarización longitudinal. La función transversal $F(\mathbf{r})$ tendrá en general la forma:

$$F(\mathbf{r}) = F(r) e^{il\phi},$$

donde la función radial estará determinada por los modos utilizados. En este trabajo utilizaremos modos de Bessel, aunque también existen otros, como los de Laguerre-Gauss, que se obtienen a partir de los de Hermite-Gauss [10]. La dependencia acimutal de la componente transversal de la polarización implica que los **frentes de onda son helicoidales**.

Para el caso de un modo l de Bessel, la función radial transversal tiene la forma:

$$F_l(r) = J_l(q_r r),$$

donde J_l es la función de Bessel de orden l , y q_r es la componente del momento lineal en la dirección radial, es decir, $\mathbf{q} = q_r \hat{r} + q_z \hat{z}$. En cuanto a la parte longitudinal:

$$G(\mathbf{r}) = -i \frac{q_r}{q_z} J_{l+1}(q_r r) e^{i(l+1)\phi}.$$

Estos modos cumplen la condición de ser simultáneamente autoestados de los operadores \mathbf{S}_z (espín en la dirección de propagación) y \mathbf{L}_z al hacer una formulación cuántica de la luz [8].

Bibliografía

- [1] N. Ashcroft and N. Mermin *Solid State Physics* (Saunders College, Philadelphia, PA, 1976)
- [2] Gerald D. Mahan, *Many-Particle-Physics*, 3rd ed. (Kluwer Academic, New York, 2000)
- [3] E. Gross, E. Runge and O. Heinonen, *Many Particle Theory*, (Adam Hilger, Bristol, 1991)
- [4] M. Padgett, J. Courtial, and L. Allen, *Physics Today* p.35, (Mayo 2004)
- [5] L. Allen, M. W. Beijersbergen, R. J. C. Spreeuw and J. P. Woerdman, *Phys. Rev. A* **45**, 8185 (1992).
- [6] J. Tabosa, D. Petrov, *Phys. Rev. Lett.* **83**(24) (1999)
- [7] J. Courtial and K. O'Holleran, *Eur. Phys. J. Special Topics* **145** 35 (2007)
- [8] S. J. Van Enk and G. Nienhuis, *Journal of Modern Optics* **41**(5) (1994)
- [9] R. A. Beth, *Phys. Rev.* **50**, 115 (1936)
- [10] L. C. Dávila Romero, D. L. Andrews and M. Babiker, *Journal of Optics B* (2002)

Capítulo 3

Grafeno: modelo de enlaces fuertes

3.1. Estructura de bandas

En la figura 3.1(a) se muestra la estructura de red del grafeno, compuesta de átomos de carbono organizados en forma de panal de abejas, con una distancia entre átomos de carbono $a \approx 1,42 \text{ \AA}$. Si bien este tipo de estructura no es una red de Bravais, es posible verla como una red hexagonal (o triangular) con una base de dos átomos por celda unidad, como se ve en la figura. Es decir, la red está compuesta por dos redes triangulares intercaladas (subred A y subred B). Podemos escribir los vectores primitivos de la red:

$$\mathbf{T}_1 = \sqrt{3}a\hat{x} \quad (3.1)$$

$$\mathbf{T}_2 = \sqrt{3}a \left(\frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y} \right) \quad (3.2)$$

En la figura 3.1 se muestra a la derecha la red recíproca, cuyos vectores primitivos estarán dados por:

$$\mathbf{G}_1 = \frac{4\pi}{3a} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{k}_x - \frac{1}{2}\hat{k}_y \right)$$

$$\mathbf{G}_2 = \frac{4\pi}{3a}\hat{k}_y$$

y cumplen que $\mathbf{T}_i \cdot \mathbf{G}_j = 2\pi\delta_{ij}$. También se observa en la figura la primera zona de Brillouin (BZ), y en particular los puntos \mathbf{K} y \mathbf{K}' , ubicados en las esquinas de la zona de Brillouin,

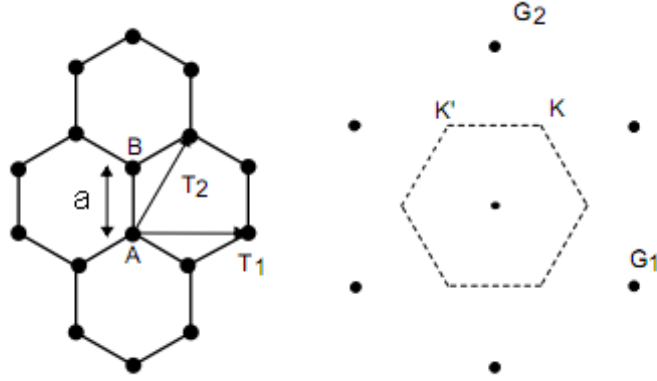


Figura 3.1: Estructura de red del grafeno en el espacio directo y recíproco. La red primitiva se muestra a la izquierda y contiene dos subredes A y B. \mathbf{T}_1 y \mathbf{T}_2 son los vectores primitivos de la red. A la derecha se muestra la primera zona de Brillouin, donde \mathbf{K} y \mathbf{K}' corresponden a los puntos de Dirac.

llamados *puntos de Dirac*, que son de particular importancia en la física del grafeno. Sus posiciones en el espacio recíproco son:

$$\begin{aligned}\mathbf{K} &= \frac{1}{3}(\mathbf{G}_1 + 2\mathbf{G}_2) = \frac{2\pi}{3a} \left(\frac{1}{\sqrt{3}}\hat{k}_x + \hat{k}_y \right) \\ \mathbf{K}' &= \frac{1}{3}(-\mathbf{G}_1 + \mathbf{G}_2) = \frac{2\pi}{3a} \left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\hat{k}_x + \hat{k}_y \right)\end{aligned}\quad (3.3)$$

Consideramos para describir la estructura de bandas del grafeno un Hamiltoniano tipo Tight-Binding, considerando un electrón por átomo en orbitales tipo $2p_z$, que pueden ser tratados independientemente de los demás electrones de valencia, ya que las bandas enlazantes y anti-enlazantes tipo σ se encuentran muy separadas en energía. Entonces, consideramos estados de la forma:

$$\psi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} [b_{A,\mathbf{k}}\Phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}) + b_{B,\mathbf{k}}\Phi(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{d}_B)] \quad (3.4)$$

donde las funciones de onda $\Phi(\mathbf{r})$ se corresponden con orbitales del tipo $2p_z$, y se suma sobre todos los vectores de la red directa \mathbf{R} . \mathbf{d}_B se corresponde con el vector de la base que describe el desplazamiento de la subred tipo B con respecto a la subred tipo A, es decir, $\mathbf{d}_B = a\hat{y}$.

Los coeficientes $b_{A,\mathbf{k}}$ y $b_{B,\mathbf{k}}$ están dados por:

$$[E(\mathbf{k}) - E_m^0]b_{m,\mathbf{k}} + \sum_n (\beta_{m,n} + \sum_{\mathbf{R} \neq 0} \gamma_{m,n}(\mathbf{R})e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}})b_{n,\mathbf{k}} = 0 \quad (3.5)$$

Donde los índices m y n hacen referencia a los elementos de la base, es decir, las distintas subredes, en este caso $m, n = A, B$. E_m^0 es la energía del orbital en el sitio m , en este caso son todos orbitales tipo $2p_z$ de átomos de carbono de modo que $E_A^0 = E_B^0$. El término con $\beta_{m,n}$ hace referencia a *orbitales* (átomos) distintos en una misma celda, es decir, si $m = n$ es la integral de campo cristalino, y es la integral de salto si $m \neq n$ entre orbitales tipo A y tipo B de una misma celda (ver sección 2.1). Además, $\gamma_{m,n}$ es la integral de salto para diferentes celdas, entre un orbital tipo n y uno tipo m .

Vamos a considerar interacción a primeros vecinos, donde los primeros vecinos de un átomo tipo A (B) son del tipo B (A), y están ubicados en: $\mathbf{R} = 0$ (la misma celda), $\mathbf{R} = -\mathbf{T}_2$, y $\mathbf{R} = \mathbf{T}_1 - \mathbf{T}_2 = -(\mathbf{T}_2 - \mathbf{T}_1)$ para un átomo tipo A, y con el signo opuesto para un tipo B. Considerando una amplitud de *hopping* (probabilidad de salto) t para primeros vecinos, obtenemos la siguiente matriz para el Hamiltoniano de Tight-Binding:

$$H(\mathbf{k}) = t \begin{pmatrix} 0 & 1 + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}_2} + e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{T}_2 - \mathbf{T}_1)} \\ 1 + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}_2} + e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{T}_2 - \mathbf{T}_1)} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

Al diagonalizar este Hamiltoniano se obtienen las siguientes bandas de energía [2]:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm t \sqrt{2 + 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right)}. \quad (3.7)$$

En la figura 3.2 puede apreciarse el gráfico de la estructura de bandas del grafeno, dada por la ecuación (3.7), considerando *hopping* a primeros vecinos t . Puede observarse que las bandas se tocan en las esquinas de la 1° Zona de Brillouin, puntos donde la energía se anula. Estos son los puntos a los que llamamos **puntos de Dirac**, definidos por la ecuación (3.3), y se puede apreciar que cerca de esos puntos, la relación de dispersión es cónica, lo que recuerda lo que ocurre con fermiones relativistas. Por esta razón, es interesante estudiar las excitaciones de baja energía del grafeno, correspondientes a desarrollar el Hamiltoniano alrededor de los puntos de Dirac \mathbf{K} y \mathbf{K}' .

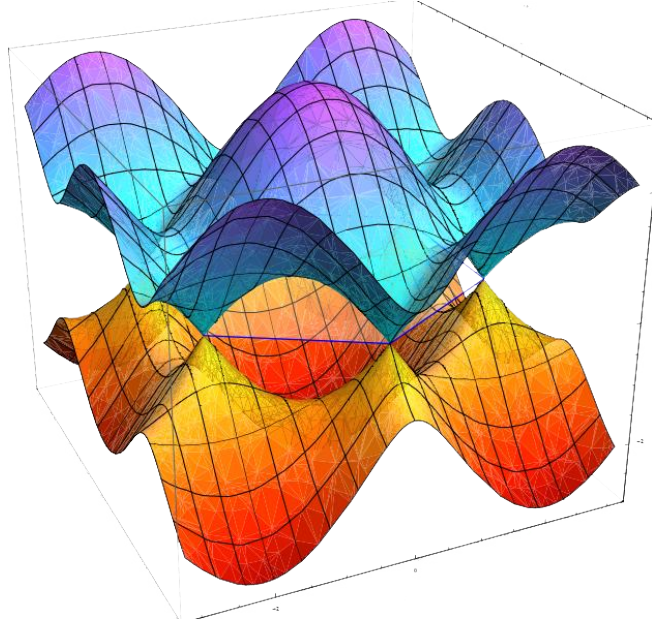


Figura 3.2: Estructura de bandas para el grafeno, calculada con el modelo de *tight-binding* considerando interacciones a primeros vecinos.

Hacemos el desarrollo, por ejemplo alrededor de \mathbf{K} , pensamos $\mathbf{k}=\mathbf{K}+\mathbf{q}$, con \mathbf{q} tal que $qa \ll 1$ (aproximación de longitudes de onda largas), para ello calculamos:

$$\begin{aligned} \mathbf{k} \cdot \mathbf{T}_2 &= \left[\frac{1}{3}(\mathbf{G}_1 + \mathbf{G}_2) + \mathbf{q} \right] \cdot \mathbf{T}_2 = \frac{4\pi}{3} + \frac{a}{2}(\sqrt{3}q_x + 3q_y) \\ \mathbf{k} \cdot (\mathbf{T}_2 - \mathbf{T}_1) &= \left[\frac{1}{3}(\mathbf{G}_1 + \mathbf{G}_2) + \mathbf{q} \right] \cdot (\mathbf{T}_2 - \mathbf{T}_1) = \frac{2\pi}{3} - \frac{a}{2}(\sqrt{3}q_x - 3q_y) \end{aligned}$$

Con ello calculamos los términos que aparecen en (3.6), por ejemplo:

$$\begin{aligned} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}_2} &= e^{-i4\pi/3} e^{-i(\sqrt{3}aq_x + 3aq_y)/2} = \left(-\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2}i \right) e^{-i(\sqrt{3}aq_x + 3aq_y)/2} \simeq \\ &\simeq \left(-\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2}i \right) \left(1 - i\frac{\sqrt{3}}{2}aq_x - i\frac{3}{2}aq_y \right) \end{aligned}$$

donde en el último término se ha utilizado la aproximación de longitud de onda larga, $q_x a \ll 1$, $q_y a \ll 1$. Calculando análogamente los otros términos, se obtiene la siguiente expresión

para la matriz del Hamiltoniano de Tight-Binding alrededor del punto \mathbf{K} :

$$H_{\mathbf{K}}(\mathbf{q}) = \frac{3ta}{2} \begin{pmatrix} 0 & q_x + iq_y \\ q_x - iq_y & 0 \end{pmatrix}$$

Es decir que se obtiene un Hamiltoniano de Dirac no-masivo bidimensional alrededor del punto \mathbf{K} , al igual que en el caso análogo alrededor de \mathbf{K}' :

$$H_{\mathbf{K}} = \hbar v_F \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \mathbf{q} \quad (3.8)$$

$$H_{\mathbf{K}'} = -\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q} \quad (3.9)$$

donde $v_F = 3at/2\hbar$ es la velocidad de Fermi, y $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ son las matrices de Pauli, con $\boldsymbol{\sigma}^* = (\sigma_x, -\sigma_y)$. Si identificamos los puntos de Dirac no equivalentes con $\alpha = 1$ para \mathbf{K} y $\alpha = -1$ para \mathbf{K}' , podemos resumir el resultado en un solo Hamiltoniano:

$$H_\alpha = \alpha \hbar v_F (\sigma_x q_x - \alpha \sigma_y q_y). \quad (3.10)$$

Diagonalizando la matriz se obtienen las autoenergías ($q = |\mathbf{q}|$):

$$E_{\mathbf{K}}(\mathbf{q}) = \pm \hbar v_F q, \quad (3.11)$$

y con ello se obtienen los autovectores y los coeficientes para el estado de TB:

$$\begin{pmatrix} b_{A,\mathbf{q}} \\ b_{B,\mathbf{q}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ \pm 1 \end{pmatrix},$$

donde $\theta = \arctan(q_y/q_x)$. Introduciendo este resultado en la ecuación (3.4), y realizando en dicha ecuación el correspondiente desarrollo alrededor del punto \mathbf{K} , se obtiene una expresión para los estados:

$$\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} e^{i\theta} u_{1,\mathbf{K},\mathbf{q}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \\ \pm 1 u_{2,\mathbf{K},\mathbf{q}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \end{pmatrix}.$$

Donde:

$$\begin{aligned} u_{1,K}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) &= \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{R})} \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \\ u_{2,K}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) &= \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{R})} \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{R} + \mathbf{d}_B) \end{aligned}$$

son funciones microscópicas que varían rápidamente en la red y cuyo efecto despreciaremos en la aproximación de longitudes de onda largas, de modo que el resultado para los autoestados sin normalizar es:

$$\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{q}) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ \pm 1 \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Análogamente para el punto \mathbf{K}' , se obtiene:

$$\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{q}) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} \pm 1 \\ e^{i\theta} \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

Los signos + y - se corresponden con la banda superior (electrones) e inferior (agujeros) respectivamente.

En estos estados, entonces, ya no quedan rastros de la red microscópica. Sin embargo, al escribirlos en forma de espinores, la información sobre la existencia de dos subredes se condensa en las componentes del espinor, por lo que la información sobre la red no se ha perdido del todo, aunque estemos en la aproximación de longitudes de onda grandes. Volveremos sobre este tema con más detalle en la sección 3.3.

3.2. Resolución en coordenadas polares

En la sección anterior vimos que las excitaciones de baja energía en el grafeno pueden representarse con un Hamiltoniano tipo Dirac 2D no masivo. Considero entonces para el problema un Hamiltoniano efectivo como el de la ecuación 3.10, donde puedo escribir $\hbar\mathbf{q} = \mathbf{p} = -i\hbar\nabla$, ya que en cartesianas esta sustitución da lugar a la misma solución que el

problema de *tight binding*, de modo que:

$$H_\alpha = -i\alpha\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial}{\partial x} + i\alpha\frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial x} - i\alpha\frac{\partial}{\partial y} & 0 \end{pmatrix}$$

Para pasar a coordenadas polares ($x = r \cos \theta$ e $y = r \sin \theta$), defino los operadores L_+ y L_- :

$$L_\pm = e^{\pm i\theta} \left(\frac{\partial}{\partial r} \pm i \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (3.14)$$

Con estos operadores puedo definir las matrices Hamiltonianas alrededor de los puntos \mathbf{K} y \mathbf{K}' :

$$H_K = -i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & L_+ \\ L_- & 0 \end{pmatrix}; \quad H_{K'} = i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & L_- \\ L_+ & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

Propongo como solución un espinor de dos componentes Ψ cuyas componentes ψ_1 y ψ_2 deben cumplir la ecuación de autovalores $H\Psi = E\Psi$, es decir, para \mathbf{K} :

$$\begin{aligned} -i\alpha\hbar v_F L_+ \psi_2 &= E\psi_1 \\ -i\alpha\hbar v_F L_- \psi_1 &= E\psi_2 \end{aligned} \quad (3.16)$$

y para \mathbf{K}' :

$$\begin{aligned} i\alpha\hbar v_F L_- \psi_2 &= E\psi_1 \\ i\alpha\hbar v_F L_+ \psi_1 &= E\psi_2 \end{aligned} \quad (3.17)$$

Esto significa que, por ejemplo para el punto \mathbf{K} , ψ_1 y ψ_2 deben ser solución de las siguientes ecuaciones diferenciales acopladas:

$$\begin{aligned} -i\alpha\hbar v_F e^{i\theta} \left(\frac{\partial}{\partial r} + i \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \psi_2 &= E\psi_1 \\ -i\alpha\hbar v_F e^{-i\theta} \left(\frac{\partial}{\partial r} - i \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \psi_1 &= E\psi_2 \end{aligned} \quad (3.18)$$

Despejando ψ_2 de la segunda ecuación y reemplazándolo en la primera, se obtiene:

$$\begin{aligned}
 i\hbar v_F e^{i\theta} \left(\frac{\partial}{\partial r} + i \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \frac{i\hbar v_F}{E} e^{-i\theta} \left(\frac{\partial}{\partial r} - i \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \psi_1 &= E \psi_1 \\
 \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial}{\partial r} - i \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + i \frac{1}{r} e^{i\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(e^{-i\theta} \left(\frac{\partial}{\partial r} - i \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right) \right] \psi_1 &= -\frac{E^2}{\hbar^2 v_F^2} \psi_1 \\
 \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} - i \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \theta} + i \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} + i \frac{1}{r} \left(-i \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \theta} - i \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \right] \psi_1 &= -\frac{E^2}{\hbar^2 v_F^2} \psi_1 \\
 \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi_1}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial \theta^2} &= -q^2 \psi_1
 \end{aligned}$$

donde en la última ecuación se ha definido $q = E/\hbar v_F$. Proponemos para ψ_1 una solución de variables separadas de la forma $\psi_1(r, \theta) = R(r)P(\theta)$, obteniendo dos ecuaciones independientes para R y P, dada una constante de separación m. Para $P(\theta)$ se tiene:

$$\frac{\partial^2 P}{\partial \theta^2} + m^2 P = 0 \quad \rightarrow \quad P(\theta) \propto e^{im\theta}$$

Pidiendo condiciones de contorno periódicas ($P(\theta + 2\pi) = P(\theta) \quad \forall \theta$) se obtiene la condición sobre la variable de separación $m \in \mathbb{Z}$. La ecuación para $R(r)$ queda:

$$r^2 \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + r \frac{\partial R}{\partial r} + (q^2 r^2 - m^2) R = 0 \tag{3.19}$$

que es la ecuación de Bessel para $x = qr$, y cuyas soluciones son las funciones de Bessel $J_m(qr)$, de manera que las soluciones para ψ_1 son de la forma:

$$\psi_1(r, \theta) \sim J_m(qr) e^{im\theta}$$

Ahora bien, si en lugar de realizar el reemplazo de la segunda ecuación en la primera en (3.18), la misma forma funcional se obtendría para ψ_2 , y lo mismo ocurriría con las ecuaciones para el punto \mathbf{K}' , de modo que es posible afirmar que en general, las componentes de los espinores tendrán la forma:

$$\psi_{m,\nu}(r, \theta) = \frac{N_{m,\nu}}{2\pi} J_m(qr) e^{im\theta}. \tag{3.20}$$

El índice ν viene de considerar las condiciones de contorno para la variable r : considerando un sistema de grafeno en un disco de radio r_0 , las funciones de Bessel deben anularse para

$r = r_0$, es decir, debe valer $q_{m\nu}r_0 = x_{m\nu}$, donde $x_{m\nu}$ es el ν -ésimo cero de la función de Bessel de orden m , es decir, que los valores de momento $q_{m\nu}$ están discretizados. $N_{m,\nu}$ es la constante de normalización para la parte radial, proveniente de pedir $\int_0^{r_0} r dr J_m^2(q_{m,\nu}r)$, lo que resulta en:[4]

$$N_{m,\nu} = \frac{\sqrt{2}}{r_0 J_{m+1}(x_{m\nu})}$$

Para encontrar las relaciones entre los índices de cada componente, es necesario volver a las ecuaciones en (3.16) y (3.17), para lo cual es útil ver cómo actúan los operadores L_+ y L_- en un estado ψ de la forma dada por (3.20). Para ello es necesario calcular $\partial J_m(qr)/\partial r$. Considero las siguientes identidades para las derivadas de las funciones de Bessel [5]:

$$\left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz}\right)^k [z^m J_m(z)] = z^{m-k} J_{m-k}(z) \quad (3.21)$$

$$\left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz}\right)^k [z^{-m} J_m(z)] = (-1)^k z^{-m-k} J_{m+k}(z) \quad (3.22)$$

Usando la ecuación (3.21) para $k = 1$, $z = qr$, se tiene:

$$\frac{\partial J_m(qr)}{\partial r} = -\frac{m}{r} J_m(qr) + q J_{m-1}(qr),$$

de modo que:

$$\begin{aligned} L_- \psi_m &= e^{-i\theta} \left(\frac{\partial}{\partial r} - i \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) e^{im\theta} J_m(qr) = e^{i(m-1)\theta} \left(\frac{\partial J_m}{\partial r} + \frac{m}{r} J_m(qr) \right) \\ &= q e^{i(m-1)\theta} J_{m-1}(qr) = q \psi_{m-1} \end{aligned}$$

Y usando la ecuación (3.22) para $k = 1$, $z = qr$, se obtiene:

$$\frac{\partial J_m(qr)}{\partial r} = \frac{m}{r} J_m(qr) - q J_{m+1}(qr),$$

de modo que:

$$\begin{aligned} L_+ \psi_m &= e^{i\theta} \left(\frac{\partial}{\partial r} + i \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) e^{im\theta} J_m(qr) = e^{i(m+1)\theta} \left(\frac{\partial J_m}{\partial r} - \frac{m}{r} J_m(qr) \right) \\ &= q e^{i(m+1)\theta} J_{m+1}(qr) = -q \psi_{m+1} \end{aligned}$$

Es decir que los operadores L_+ y L_- actúan sobre las componentes de los espinores, ψ , de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} L_+ \psi_m &= -q\psi_{m+1} \\ L_- \psi_m &= q\psi_{m-1} \end{aligned} \quad (3.23)$$

Entonces vemos que, para los espinores Ψ correspondientes a cada punto de Dirac, debe proponerse una solución cuyas componentes difieran en su índice m en una unidad. Para el punto \mathbf{K} , propongo estados de la forma:

$$\Psi_{m,\nu,K}^v = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \psi_{m+1,\nu} \\ i\psi_{m,\nu} \end{pmatrix}; \quad \Psi_{m,\nu,K}^c = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \psi_{m+1,\nu} \\ -i\psi_{m,\nu} \end{pmatrix}, \quad (3.24)$$

donde $\psi_{m,\nu}$ están dados por la ecuación (3.20), y se ha agregado un factor de normalización $1/\sqrt{2}$ para que se cumpla que $\int d\mathbf{r} \Psi^\dagger(r, \theta) \Psi(r, \theta) = 1$. Usando las propiedades para aplicar los operadores L_\pm a los estados tipo $\psi_{m,\nu}$ dadas por la ecuación (3.23), puede corroborarse que $H\Psi_{m,\nu,K}^v = -q\hbar v_F$, es decir, es un estado de valencia (del cono inferior); y $H\Psi_{m,\nu,K}^c = q\hbar v_F$, es decir, es un estado de conducción (del cono superior). Análogamente, para el punto \mathbf{K}' se tiene:

$$\Psi_{m,\nu,K'}^v = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \psi_{m,\nu} \\ i\psi_{m+1,\nu} \end{pmatrix}; \quad \Psi_{m,\nu,K'}^c = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \psi_{m,\nu} \\ -i\psi_{m+1,\nu} \end{pmatrix}, \quad (3.25)$$

3.3. Pseudoespín, Momento Angular y Helicidad

En las secciones anteriores encontramos que los autoestados del Hamiltoniano efectivo dados por (3.24) y (3.25) tienen dos componentes. Estas componentes no están asociadas al espín físico del electrón (el mismo no fue tenido en cuenta en los cálculos de *tight binding*), sino que están relacionadas a la amplitud relativa de las funciones de Bloch en las subredes A o B. Este grado de libertad es frecuentemente denominado *pseudoespín*, ya que cumple un rol en el Hamiltoniano efectivo análogo al que cumple el espín en el Hamiltoniano de Dirac [6]. Este pseudoespín, que cumple el mismo álgebra $SU(2)$ que el espín, puede interpretarse de la siguiente manera: si en un dado estado todos los electrones estuvieran localizados en átomos del tipo A, y no hubiera ningún electrón en los átomos tipo B, entonces este estado tendría su pseudoespín en la dirección \hat{z} , apuntando hacia arriba (es decir, saliendo del plano

del grafeno). Si la densidad de electrones estuviera, en cambio, puramente localizada en los átomos tipo B, entonces el pseudoespín apuntaría hacia abajo. En este caso sería nula la primer componente del espinor, mientras que en el caso anterior sería nula la segunda componente del mismo.

En el grafeno, la densidad electrónica usualmente está distribuida de manera homogénea entre las dos subredes, por lo que es de esperar que la parte de la función de onda correspondiente al pseudoespín sea una combinación lineal de *arriba* y *abajo*, y esté en el plano de la hoja de grafeno. Podemos corroborar este hecho para los estados hallados en (3.24) y (3.25) si definimos un operador de pseudoespín $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$. Aquí es importante notar que si bien en el Hamiltoniano efectivo no aparece la componente z del pseudoespín, al igual que la componente z del momento \mathbf{q} , esto no significa que los operadores σ_z y q_z sean nulos, como se aclara en la referencia [7]. Sí podemos corroborar, sin embargo, que el valor medio de la componente z del pseudoespín se anula para cualquiera de los estados encontrados, por ejemplo, para los estados cerca de \mathbf{K} :

$$\begin{aligned} \langle m\nu K | \sigma_z | m\nu K \rangle &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} (\psi_{m+1}^*, \mp i\psi_m^*) \sigma_z (\psi_{m+1}, \pm i\psi_m)^T = \\ &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} (\psi_{m+1}^*, \mp i\psi_m^*) (\psi_{m+1}, -(\pm i\psi_m))^T = \\ &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} (|\psi_{m+1}|^2 - |\psi_m|^2) = 0, \end{aligned}$$

donde los signos \pm corresponden a los estados de conducción y valencia respectivamente, y para mayor claridad hemos omitido el índice ν en las funciones de onda $\psi_{m,\nu}$, que están definidas en (3.20) y normalizadas de acuerdo a lo indicado en la sección 3.2.

Consideremos ahora el operador momento angular orbital. Su componente en \hat{z} estaría dada por:

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta} \mathbb{I},$$

donde la identidad actúa en el espacio de subredes (es decir, en las componentes del espinor, o, como vimos al principio de esta sección, el espacio de pseudoespín). Recordando la definición de las funciones de onda ψ dadas por (3.20), es fácil ver la forma en la que el operador momento angular actúa sobre ellas:

$$L_z \psi_m = m\hbar \psi_m, \tag{3.26}$$

de modo que puede asociarse el índice m de las funciones de onda ψ dadas por (3.20) con su momento angular. Ahora bien, los autoestados del Hamiltoniano efectivo para el grafeno son espinores de cuyas componentes están dadas por funciones ψ con distinto índice m , de manera que resulta obvio que estos estados **no serán autoestados del momento angular orbital**.

Como el Hamiltoniano efectivo alrededor de cada punto de Dirac da lugar a un espectro isótropo en el espacio recíproco (el espectro de energías sólo depende del módulo de \mathbf{q}), entonces este sistema tiene invariancia rotacional [7], por lo que ó bien debe haber otro conjunto de autoestados del H que sí sea autoestado del momento angular orbital, o bien debe haber otro momento angular involucrado en el problema de modo que haya un conjunto común de autoestados del Hamiltoniano y el momento angular total. Es fácil ver que debe ser el segundo caso, ya que el momento angular orbital no conmuta con el Hamiltoniano, resultando:

$$\begin{aligned} [H, L_z] &= [H, (\mathbf{r} \times \mathbf{p})_z] = \alpha \hbar^2 v_F [\sigma_x q_x - \alpha \sigma_y q_y, r_x q_y - r_y q_x] \\ &= -i \hbar v_F \alpha (\sigma_x p_y + \sigma_y p_x) \end{aligned}$$

Es posible notar, entonces, que combinando el momento angular orbital l_z con el pseudoespín σ_z se obtiene un momento angular total que no sólo conmuta con el Hamiltoniano, sino que también cumple que los estados hallados en (3.24) y (3.25) son autoestados de dicho operador, cuya componente en \hat{z} está dada por:

$$J_z^\alpha = L_z - \alpha \frac{\hbar}{2} \sigma_z = -i \hbar \frac{\partial}{\partial \theta} \mathbb{I} - \alpha \frac{\hbar}{2} \sigma_z \quad (3.27)$$

Es fácil aplicar este operador a los autoestados de H . Por ejemplo, para los estados cerca de \mathbf{K} ($\alpha = 1$) dados por (3.24):

$$J_z \Psi_{m,\nu,K} = \begin{pmatrix} \hbar(m+1)\psi_{m+1,\nu} \\ \hbar m(\pm i)\psi_{m,\nu} \end{pmatrix} - \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \psi_{m+1,\nu} \\ -(\pm i)\psi_{m,\nu} \end{pmatrix} = \left(m + \frac{1}{2}\right) \hbar \Psi_{m,\nu,K}$$

Haciendo un cálculo análogo para los estados cerca del punto \mathbf{K}' dados por (3.25), se encuentra que su autovalor es, también, $j_z = (m + 1/2)\hbar$. Teniendo esto en cuenta, y la consideración hecha al principio de la sección sobre el valor medio de la componente en z del pseudoespín,

se encuentra que el valor medio del momento angular orbital para cualquiera de estos estados debe coincidir con el valor medio del momento angular total, que coincide con el **valor del momento angular total**, puesto que esta cantidad sí está bien definida para estos estados, y es una constante de movimiento. Es decir:

$$j_z = \langle m\nu K | J_z | m\nu K \rangle = \langle m\nu K | \sigma_z | m\nu K \rangle + \langle m\nu K | l_z | m\nu K \rangle = \langle m\nu K | l_z | m\nu K \rangle. \quad (3.28)$$

Esto puede corroborarse calculando explícitamente el valor medio para l_z :

$$\begin{aligned} \langle m\nu K | L_z | m\nu K \rangle &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} (\psi_{m+1}^*, \mp i\psi_m^*) l_z (\psi_{m+1}, \pm i\psi_m)^T = \\ &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} (\psi_{m+1}^*, \mp i\psi_m^*) ((m+1)\hbar\psi_{m+1}, m\hbar \pm i\psi_m)^T = \\ &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} [(m+1)\hbar|\psi_{m+1}|^2 + m\hbar|\psi_m|^2] = \frac{1}{2}(2m+1)\hbar = \left(m + \frac{1}{2}\right) \hbar. \end{aligned}$$

Con la ayuda de estos resultados, es posible darle una interpretación al índice m que etiqueta a los autoestados de H hallados en la sección 3.2. En primer lugar, como se vio en la ecuación (3.26), m es el momento angular orbital de las funciones de onda ψ_m que conforman las componentes de los espinores Ψ_m . Pero, además, la ecuación anterior indica que m también está relacionado con el valor medio del momento angular orbital del espinor Ψ_m , que es $\langle l_z \rangle = (m + 1/2)\hbar$ para todos los estados involucrados en el problema. Por último, como mostramos en la ecuación (3.28), el índice m también se asocia al **momento angular total** de un espinor, que también vale $j_z = (m + 1/2)\hbar$ para los estados de valencia y conducción asociados a los puntos \mathbf{K} y \mathbf{K}' . Es decir que un espinor de la forma $\Psi_{m,\nu}$ tiene un momento angular total $j_z = (m + 1/2)\hbar$ que es una constante del movimiento, por lo que es a éste número cuántico al que resulta más útil asociarle el índice m .

El operador momento angular orbital que definimos, L_z , es un momento angular *envelope*, es decir, que actúa sobre la envolvente de la función de onda, pues es diagonal en el pseudo-espín, que es la variable que contiene información sobre la parte microscópica de la misma. Como sabemos que el pseudoespín contiene la información sobre la red, es decir, sobre la parte microscópica del espacio, podemos pensar que el momento angular total que hemos definido, J_z , es un momento angular orbital que contiene tanto la parte microscópica como la envolvente.

Existe, además del momento angular total, otro operador que conmuta con el Hamiltoniano del problema y que agrega importante información sobre la física del sistema. Este operador es la *helicidad*, definida como:

$$\Sigma = \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{p} = \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{q} = \hbar \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q}}{q}. \quad (3.29)$$

La helicidad es, en el caso de este sistema, la componente de pseudoespín en la dirección del movimiento. Recordando la forma del Hamiltoniano del sistema dado por (3.10), es fácil ver que la helicidad conmuta con H , por lo que es una constante de movimiento. De esta manera, vemos que los autoestados del Hamiltoniano tienen helicidad bien definida, en particular:

$$\begin{aligned} \Sigma \Psi_{m,\nu,\alpha}^c &= +\hbar \Psi_{m,\nu,\alpha}^c \\ \Sigma \Psi_{m,\nu,\alpha}^v &= -\hbar \Psi_{m,\nu,\alpha}^v \end{aligned}$$

Es decir que los estados de **conducción tienen helicidad $+\hbar$** , y los estados de **valencia tienen helicidad $-\hbar$** , independientemente del punto de Dirac. Este número cuántico agrega información sobre la física de los autoestados del sistema y, a diferencia de lo ocurrido con el momento angular total, permite distinguir entre los estados de conducción y valencia. El tener una constante de movimiento asociada con el pseudoespín que distinga entre los estados de las distintas bandas será de gran utilidad al estudiar la interacción con luz.

Bibliografía

- [1] N. Ashcroft and N. Mermin *Solid State Physics* (Saunders College, Philadelphia, PA, 1976)
- [2] A. Castro Neto, F. Guinea, N. Peres, K. Novoselov and A. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009)
- [3] K. Novoselov, A. Geim, S. Morozov, D. Jiang, M. Katsnelson, I. Grigorieva, S. Dubonos, and A. Firsov, *Nature* **306**, 666 (2004)
- [4] John David Jackson, *Classical Electrodynamics* (John Wileys and Sons, 1966)
- [5] M. Abramowitz and I. Stegun, *Handbook of mathematical functions* (1972)
- [6] E. McCann, *Electronic Properties of monolayer and bilayer graphene* (Springer, 2012)
- [7] M. Mecklenburg and B. C. Regan, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 116803 (2011)

Capítulo 4

Interacción con luz con momento angular orbital

4.1. Hamiltoniano de interacción

Considero el potencial vector para un haz de luz con momento angular orbital en el gauge de Coulomb, para modos de Bessel, y en coordenadas cilíndricas (tales que $\mathbf{k} \equiv q_z \hat{z} + \mathbf{q}$)¹

$$\mathbf{A}_{\mathbf{q}l\sigma}(\mathbf{r}, t) = A_0 e^{i(q_z z - \omega t)} \left[\boldsymbol{\epsilon}_\sigma J_l(qr) e^{il\theta} - \sigma i \hat{z} \frac{q}{q_z} J_{l+\sigma}(qr) e^{i(l+\sigma)\theta} \right] + c.c. \quad (4.1)$$

donde $\boldsymbol{\epsilon}_\sigma$ son los vectores de polarización, con $\sigma = \pm 1$, $\boldsymbol{\epsilon}_\sigma = \hat{x} + i\sigma \hat{y}$. Obtenemos el Hamiltoniano de interacción mediante la prescripción habitual $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - Q\mathbf{A} = \mathbf{p} + e\mathbf{A}$, haciendo dicho reemplazo en la expresión de la ecuación 3.10. Esta sustitución está justificada en un Hamiltoniano tipo Dirac pues se obtiene al pedir que, en formulación Lagrangiana de campos clásicos, el Lagrangiano sea invariante ante transformaciones de gauge locales para el campo de partícula y el campo electromagnético [1]. Entonces se obtiene:

$$H_{total}^\alpha = \alpha \hbar v_F (\sigma_x q_x - \alpha \sigma_y q_y) + \alpha e v_F (\sigma_x A_x - \alpha \sigma_y A_y) \equiv H_0^\alpha + H_{int}^\alpha, \quad (4.2)$$

¹De ahora en más se utilizará \mathbf{q} para referirse al momento de la luz, y $\mathbf{q}_{m,\nu}$ para el momento de los electrones, que está discretizado.

donde las soluciones de H_0 en coordenadas polares están dadas por (3.24) y (3.25). Es decir, que obtenemos para el Hamiltoniano de interacción:

$$H_{int}^\alpha = \alpha e v_F (\sigma_x A_x - \alpha \sigma_y A_y) = \alpha e v_F \begin{pmatrix} 0 & A_x + i\alpha A_y \\ A_x - i\alpha A_y & 0 \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

es decir que sólo nos interesan los términos en \hat{x} y \hat{y} de (4.1). Además, como estudiamos un sistema bidimensional, consideramos que el disco de grafeno está ubicado en la posición $z = 0$, y el potencial vector para un haz de *twisted light* tiene la forma:

$$\mathbf{A}_{ql\sigma}(r, \theta) = A_0(\hat{x} + i\sigma\hat{y})e^{-i\omega t} J_l(qr)e^{il\theta} + c.c. \quad (4.4)$$

Defino las siguientes cantidades:

$$\begin{aligned} A_{ql}^{(+)} &= A_0 e^{-i\omega t} J_l(qr) e^{il\theta} \\ A_{ql}^{(-)} &= A_0 e^{i\omega t} J_l(qr) e^{-il\theta} \end{aligned} \quad (4.5)$$

Estas cantidades son relevantes puesto que pueden asociarse con la creación (emisión) y aniquilación (absorción) de fotones, ya que al escribir el potencial vector de la luz en segunda cuantización, el término $A^{(-)} \sim \hat{b}^\dagger$, y el termino $A^{(+)} \sim \hat{b}$, donde \hat{b}^\dagger es el operador de creación para un fotón, y \hat{b} es el operador de destrucción para un fotón.

Con ayuda de estas cantidades es posible escribir las componentes del potencial vector:

$$\begin{aligned} A_{x,\sigma} &= [A_{ql}^{(+)} + A_{ql}^{(-)}] \\ A_{y,\sigma} &= i\sigma [A_{ql}^{(+)} - A_{ql}^{(-)}]. \end{aligned} \quad (4.6)$$

y, recordando la expresión para H_{int}^α en (4.3) y reemplazando las expresiones para A_x y A_y de (4.6), se obtiene la siguiente expresión para el Hamiltoniano de interacción en función del punto de Dirac (α) y de la polarización de la luz (σ):

$$H_{int}^\alpha(\sigma, q, l) = \alpha e v_F \begin{pmatrix} 0 & (1 - \sigma\alpha)A_{q,l}^{(+)} + (1 + \alpha\sigma)A_{q,l}^{(-)} \\ (1 + \alpha\sigma)A_{q,l}^{(+)} + (1 - \alpha\sigma)A_{q,l}^{(-)} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

Es conveniente desglosar este Hamiltoniano en cuatro casos, correspondientes a las com-

binaciones de las dos posibilidades para la polarización de la luz, y los dos puntos de Dirac no equivalentes. Esta separación no sólo facilita la notación y el posterior cálculo de los elementos de matriz (a realizarse en la sección siguiente), sino que además facilita la interpretación de las distintas componentes de la matriz Hamiltoniana.

Se tiene, entonces, para el punto \mathbf{K} :

$$H_{int}^K(\sigma = 1) = 2ev_F \begin{pmatrix} 0 & A_{q,l}^{(-)} \\ A_{q,l}^{(+)} & 0 \end{pmatrix}; \quad H_{int}^K(\sigma = -1) = -2ev_F \begin{pmatrix} 0 & A_{q,l}^{(+)} \\ A_{q,l}^{(-)} & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.8)$$

y para el punto \mathbf{K}' :

$$H_{int}^{K'}(\sigma = 1) = -2ev_F \begin{pmatrix} 0 & A_{q,l}^{(+)} \\ A_{q,l}^{(-)} & 0 \end{pmatrix}; \quad H_{int}^{K'}(\sigma = -1) = 2ev_F \begin{pmatrix} 0 & A_{q,l}^{(-)} \\ A_{q,l}^{(+)} & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Como puede observarse, las matrices Hamiltonianas poseen, para todas las combinaciones posibles de α y σ , solamente elementos fuera de la diagonal, y estos elementos consisten en un sólo término: $A_{q,l}^{(+)}$ ó $A_{q,l}^{(-)}$. Además, debe recordarse que las componentes de los espinores se asocian a las dos subredes de la estructura del grafeno, de modo que, si se continúa considerando la interpretación discutida anteriormente para los términos $A_{q,l}^{(+)}$ y $A_{q,l}^{(-)}$, se encuentra que al actuar el Hamiltoniano sobre un estado Ψ , este estado sólo puede crear un fotón en una subred y aniquilar un fotón en la otra. Es decir, cada uno de estos Hamiltonianos se asocia a la absorción de un fotón en una de las subredes, y a la emisión de un fotón en la otra. Cuál de las subredes es la que emite y cuál la que absorbe un fotón dependerá de dos variables: la polarización de la luz incidente (es decir, el espín del fotón absorbido o emitido) y de cuál de los dos puntos de Dirac no equivalentes se está mirando. Es importante recordar que, mientras que la polarización de la luz (σ) está fijada externamente, para obtener cualquier magnitud física macroscópicamente relevante será necesario sumar las contribuciones correspondientes a los dos puntos de Dirac (α).

Una interpretación más detallada de estas matrices puede realizarse al recordar lo discutido en la sección 3.3. Al estar las componentes de los espinores asociadas a la distribución de los electrones a lo largo de las subredes, el hecho de que las matrices de interacción posean sólo elementos fuera de la diagonal puede interpretarse de la siguiente manera: si pudiera uno tener un estado inicial en el cual todos los electrones se encontraran localizados en la subred tipo A (sería un estado con pseudoespín positivo en \hat{z}), este estado sería un espinor de la

forma $(1, 0)^T$. La matriz de interacción, por poseer sólo elementos fuera de la diagonal, sólo puede conectar este estado inicial con un estado final de la forma $(0, 1)^T$, es decir, un estado en el que todos los electrones están localizados en la subred tipo B. Entonces, la acción neta de la luz sobre el sistema sería desplazar a todos los electrones de la subred tipo A a la subred tipo B, o, lo que es equivalente, invertir el pseudoespín del estado. Ahora bien, estos estados, autoestados del operador de pseudoespín, no son autoestados del Hamiltoniano, y claramente no representan estados físicos, ya que no resulta muy probable la idea de encontrar a todos los electrones de un sólido localizados en una subred del mismo. Sin embargo, este ejemplo deja en evidencia que la interacción con la luz afecta otras variables del sistema además de la energía, relacionadas con el momento angular y el pseudoespín. Discutiremos cuáles son esas magnitudes en las secciones siguientes.

4.2. Cálculo de elementos de matriz

Para poder calcular cantidades observables relevantes para este sistema, es necesario contar con los elementos de matriz del Hamiltoniano de interacción. Los calcularemos entre un estado en la banda de conducción (cono superior) y un estado en la banda de valencia (cono inferior) con distintos valores de los índices que etiquetan a los estados: m y ν . En principio, este cálculo debería realizarse para estados cercanos a puntos de Dirac que en principio podrían ser distintos, utilizando como Hamiltoniano $H = H_K + H_{K'}$. Sin embargo, trabajaremos bajo la aproximación de longitud de onda grande para la luz incidente, es decir, valores pequeños del \mathbf{q} , de modo que podemos despreciar los términos que cruzan estados en distintos puntos de Dirac. Es decir, calcularemos el elemento de matriz $\langle cm'\nu'\alpha | H_{int}^\alpha | vm\nu\alpha \rangle$. Como las matrices correspondientes al Hamiltoniano de interacción contienen sólo elementos fuera de la diagonal, podemos prever que estos elementos de matriz sólo conectarán las componentes del estado inicial correspondientes a una subred, con las componentes del estado final correspondientes a la otra subred.

Los elementos de matriz que deben calcularse son:

$$\langle cm'\nu'\alpha | H_{int}^{\alpha,\sigma} | vm\nu\alpha \rangle = \int \Psi_{m'\nu'\alpha}^{c\dagger}(r, \theta) H_{int}^{\alpha,\sigma}(r, \theta) \Psi_{m\nu\alpha}^v(r, \theta) d^2\mathbf{r} \quad (4.10)$$

Recordado las definiciones de los estados de valencia y conducción en cada punto de Dirac dados por (3.24) y (3.25), y de las matrices Hamiltonianas para los distintos puntos de Dirac

y las distintas polarizaciones dadas por (4.8) y (4.9), se encuentra que para cada caso las integrales que deben calcularse son las siguientes (algunos índices se han omitido para mayor comodidad en la lectura, y el supraíndice \pm en el Hamiltoniano indica $\sigma = \pm 1$):

$$\begin{aligned} \langle cm'\nu'K | H_{int}^{K,+} | vm\nu K \rangle &= 2iev_F \int d\mathbf{r} [\psi_{m'+1,\nu'}^* A^{(-)} \Psi_{m,\nu} + \psi_{m',\nu'}^* A^{(+)} \Psi_{m+1,\nu}] \\ \langle cm'\nu'K | H_{int}^{K,-} | vm\nu K \rangle &= -2iev_F \int d\mathbf{r} [\psi_{m'+1,\nu'}^* A^{(+)} \Psi_{m,\nu} + \psi_{m',\nu'}^* A^{(-)} \Psi_{m+1,\nu}] \\ \langle cm'\nu'K' | H_{int}^{K',+} | vm\nu K' \rangle &= -2iev_F \int d\mathbf{r} [\psi_{m',\nu'}^* A^{(+)} \Psi_{m+1,\nu} + \psi_{m'+1,\nu'}^* A^{(-)} \Psi_{m,\nu}] \\ \langle cm'\nu'K' | H_{int}^{K',-} | vm\nu K' \rangle &= 2iev_F \int d\mathbf{r} [\psi_{m',\nu'}^* A^{(-)} \Psi_{m+1,\nu} + \psi_{m'+1,\nu'}^* A^{(+)} \Psi_{m,\nu}], \end{aligned}$$

Esto muestra que los elementos de matriz **dependen linealmente del punto de Dirac**. Por lo tanto, podemos resumir los resultados de la siguiente forma:

$$\langle cm'\nu'\alpha | H_{int}^{\alpha,+} | vm\nu\alpha \rangle = 2ie\alpha v_F \int d\mathbf{r} [\psi_{m'+1,\nu'}^* A^{(-)} \Psi_{m,\nu} + \psi_{m',\nu'}^* A^{(+)} \Psi_{m+1,\nu}] \quad (4.11)$$

$$\langle cm'\nu'\alpha | H_{int}^{\alpha,-} | vm\nu\alpha \rangle = -2ie\alpha v_F \int d\mathbf{r} [\psi_{m',\nu'}^* A^{(-)} \Psi_{m+1,\nu} + \psi_{m'+1,\nu'}^* A^{(+)} \Psi_{m,\nu}] \quad (4.12)$$

Es posible observar que los elementos de matriz contienen sólo dos términos, uno asociado a la absorción de un fotón y otro a la emisión de un fotón. De esta manera, es necesario calcular cuatro integrales diferentes:

$$\begin{aligned} a) \quad & \int d\mathbf{r} \psi_{m'+1,\nu'}^*(r, \theta) A_{q,l}^{(-)}(r, \theta) \psi_{m,\nu}(r, \theta) \\ b) \quad & \int d\mathbf{r} \psi_{m',\nu'}^*(r, \theta) A_{q,l}^{(+)}(r, \theta) \psi_{m+1,\nu}(r, \theta) \\ c) \quad & \int d\mathbf{r} \psi_{m',\nu'}^*(r, \theta) A_{q,l}^{(-)}(r, \theta) \psi_{m+1,\nu}(r, \theta) \\ d) \quad & \int d\mathbf{r} \psi_{m'+1,\nu'}^*(r, \theta) A_{q,l}^{(+)}(r, \theta) \psi_{m,\nu}(r, \theta) \end{aligned} \quad (4.13)$$

Notemos que sólo es necesario calcular dos de estas cuatro integrales, ya que $\langle m', \nu' | A_{q,l}^{(+)} | m, \nu \rangle = (\langle m, \nu | A_{q,l}^{(-)} | m', \nu' \rangle)^*$, de modo que la primera integral a) se obtiene de la segunda integral b) en (4.13) conjugando e intercambiando los índices $\nu' \leftrightarrow \nu$, $m' \leftrightarrow m$; y lo mismo ocurre con las integrales c) y d).

Calculamos, por ejemplo, la segunda integral b) en (4.13), recordando la expresión para los estados $\psi_{m,\nu}$ de la ecuación (3.20):

$$\begin{aligned}
 & \int d\mathbf{r} \psi_{m',\nu'}^*(r, \theta) A_{q,l}^{(+)}(r, \theta) \psi_{m+1,\nu}(r, \theta) = \\
 & = \int d\theta \int r dr \left[\frac{N_{m'\nu'}}{\sqrt{2\pi}} J_{m'}(q_{m'\nu'} r) e^{-im'\theta} \right] (A_0 e^{-i\omega t} J_l(qr) e^{il\theta}) \left[\frac{N_{m\nu}}{\sqrt{2\pi}} J_{m+1}(q_{m+1,\nu} r) e^{i(m+1)\theta} \right] \\
 & = A_0 e^{-i\omega t} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{i(m+l+1-m')\theta} N_{m'\nu'} N_{m\nu} \int_0^{r_0} r dr J_{m'}(q_{m'\nu'} r) J_l(qr) J_{m+1}(q_{m+1,\nu} r) \\
 & = A_0 e^{-i\omega t} \delta_{m',m+l+1} N_{m'\nu'} N_{m\nu} \int_0^{r_0} r dr J_{m'}(q_{m'\nu'} r) J_l(qr) J_{m+1}(q_{m+1,\nu} r) \\
 & = A_0 e^{-i\omega t} \delta_{m',m+l+1} N_{m'\nu'} N_{m\nu} \int_0^{r_0} r dr J_{m+1+l}(q_{m+1+l,\nu'} r) J_l(qr) J_{m+1}(q_{m+1,\nu} r)
 \end{aligned}$$

Las otras tres integrales en la ecuación (4.13) son calculadas de manera análoga, de modo que es útil definir la siguiente cantidad:

$$I_{b,\nu'}^{a,\nu'}(q, l) = N_{a\nu'} N_{b\nu} \int_0^{r_0} r dr J_a(q_{a,\nu'} r) J_l(qr) J_b(q_{b,\nu} r) \quad (4.14)$$

$$= N_{a\nu'} N_{b\nu} r_0^2 \int_0^1 x J_a(x_{a\nu'} x) J_l(qr_0 x) J_b(x_{b\nu} x) dx, \quad (4.15)$$

donde en la segunda igualdad hemos hecho el cambio de variables $r/r_0 = x$ y utilizado que $x_{m\nu} = q_{m\nu} r_0$ para adimensionalizar la integral. Con esta definición las integrales de (4.13) resultan:

$$a) \int d\mathbf{r} \psi_{m'+1,\nu'}^*(r, \theta) A_{q,l}^{(-)}(r, \theta) \psi_{m,\nu}(r, \theta) = e^{i\omega t} \delta_{m',m-(l+1)} I_{m,\nu}^{m-l,\nu'}(q, l) \quad (4.16)$$

$$b) \int d\mathbf{r} \psi_{m',\nu'}^*(r, \theta) A_{q,l}^{(+)}(r, \theta) \psi_{m+1,\nu}(r, \theta) = e^{-i\omega t} \delta_{m',m+(l+1)} I_{m+1,\nu}^{m+1+l,\nu'}(q, l)$$

$$c) \int d\mathbf{r} \psi_{m',\nu'}^*(r, \theta) A_{q,l}^{(-)}(r, \theta) \psi_{m+1,\nu}(r, \theta) = e^{i\omega t} \delta_{m',m-(l-1)} I_{m+1,\nu}^{m+1-l,\nu'}(q, l)$$

$$d) \int d\mathbf{r} \psi_{m'+1,\nu'}^*(r, \theta) A_{q,l}^{(+)}(r, \theta) \psi_{m,\nu}(r, \theta) = e^{-i\omega t} \delta_{m',m+(l-1)} I_{m,\nu}^{m+l,\nu'}(q, l)$$

Con estos resultados es posible, finalmente, calcular los elementos de matriz de (4.10), resul-

tando, para la luz con polarización circular izquierda ($\sigma = +1$),

$$\langle cm'\nu'\alpha | H_{int}^{\alpha,+} | vm\nu\alpha \rangle = 2ie\alpha v_F A_0 \left[e^{i\omega t} I_{m,\nu}^{m-l,\nu'}(q) \delta_{m',m-(l+1)} - e^{-i\omega t} I_{m+1,\nu}^{m+1+l,\nu'}(q) \delta_{m',m+(l+1)} \right] \quad (4.17)$$

Aquí el segundo término se asocia a la absorción de un fotón con momento angular orbital $l\hbar$ y espín $+\hbar$ (estado final $m' = m + l + 1$), mientras que el primer término se corresponde con la emisión de un fotón con los mismos números cuánticos (estado final $m' = m - l - 1$). Por otra parte, para luz con polarización circular derecha, $\sigma = -1$, se tiene:

$$\langle cm'\nu'\alpha | H_{int}^{\alpha,-} | vm\nu\alpha \rangle = -2ie\alpha v_F A_0 \left[e^{i\omega t} I_{m+1,\nu}^{m+1-l,\nu'}(q) \delta_{m',m-(l-1)} - e^{-i\omega t} I_{m,\nu}^{m+l,\nu'}(q) \delta_{m',m+(l-1)} \right] \quad (4.18)$$

donde el segundo término se corresponde con la absorción de un fotón con momento angular orbital $l\hbar$ y espín $-\hbar$ (estado final $m' = m - 1 + l$), mientras que el primer término se asocia a la emisión de un fotón con l y $\sigma = -1$ (estado final $m' = m + 1 - l$).

Además, debe notarse que en ambos elementos de matriz hay un término correspondiente a una transición que no resultaría energéticamente favorable: al considerar transiciones *desde* valencia *hacia* conducción, emitir un fotón no es energéticamente favorable, y en los elementos de matriz cuyo estado inicial está en conducción y el final está en valencia, no es energéticamente favorable absorber un fotón. Entonces, en la *rotating wave approximation*, podemos escribir los elementos de matriz de la siguiente manera: (ver referencia [2])

$$\begin{aligned} \langle cm'\nu'\alpha | H_{int}^{\alpha}(\sigma = 1) | vm\nu\alpha \rangle &\cong 2\alphaiev_F A_0 e^{-i\omega t} I_{m+1,\nu}^{m+1+l,\nu'}(q) \delta_{m',m+(l+1)} \\ \langle cm'\nu'\alpha | H_{int}^{\alpha}(\sigma = -1) | v, m, \nu\alpha \rangle &\cong -2i\alphaev_F A_0 e^{-i\omega t} I_{m,\nu}^{m+l,\nu'}(q) \delta_{m',m+(l-1)} \\ \langle vm'\nu'\alpha | H_{int}^{\alpha}(\sigma = 1) | cm\nu\alpha \rangle &\cong -2i\alphaev_F A_0 e^{i\omega t} I_{m,\nu}^{m-l,\nu'}(q) \delta_{m',m-(l+1)} \\ \langle vm'\nu'\alpha | H_{int}^{\alpha}(\sigma = -1) | cm\nu\alpha \rangle &\cong 2i\alphaev_F A_0 e^{i\omega t} I_{m+1,\nu}^{m+1-l,\nu'}(q) \delta_{m',m-(l-1)} \end{aligned} \quad (4.19)$$

Observando estos elementos de matriz, podemos volver al asunto discutido en las secciones anteriores, sobre cuáles son las magnitudes físicas de los electrones del grafeno que entran en juego al interactuar con la luz. En primer lugar, por supuesto, cambiará la energía, por tratarse de transiciones interbanda, de manera que al absorber un fotón se pasa de la banda de valencia a la de conducción, con mayor energía, y al emitir un fotón se pasa de la banda de conducción a la de valencia, con menor energía. Por otra parte, como se mencionó anteriormente, las Deltas de Kronecker en las variables m y m' se asocian a una transferencia de

momento angular. En particular, según lo calculado al comienzo de la sección 3.3, el estado inicial tendrá momento angular total $(m + 1/2)\hbar$, mientras que el estado final tendrá momento angular total $(m' + 1/2)\hbar$, que, en el caso de la absorción de un fotón con polarización circular izquierda, queda $j_z = (m + l + 1 + 1/2)\hbar$, donde se ve claramente que se suma al momento angular total inicial del electrón, el momento angular total del fotón absorbido, correspondiente a $+\hbar$ de su polarización o espín, y $l\hbar$ de su momento angular orbital. Este mismo razonamiento vale para los cuatro casos posibles de elementos de matriz enumerados en (4.19), de modo que queda en evidencia la manera en la que la interacción con la luz modifica el momento angular de los estados. Se encuentra, entonces, que el momento angular transferido es $\Delta j = l + 1$, lo cual es consistente con resultados de trabajos anteriores, en los cuales se observa que el momento angular de la luz y su momento de espín se suman entre sí y se suman (o restan) al momento angular del electrón cuando absorbe (o emite) un fotón. Estos resultados [3, 4] corresponden al caso de transiciones intrabandas en semiconductores, pero es aplicable a este sistema pues en este caso las dos bandas tienen la misma simetría, por lo que en algún sentido todas las transiciones son intrabanda.

Por último, en el final de la sección anterior observamos que la interacción con la luz afecta la forma en la que los electrones se distribuyen en las subredes, variable denominada pseudoespín. Sin embargo, al no ser el mismo una constante de movimiento, no resulta muy útil considerar la manera en la que la luz modifica esta variable. Resulta útil, entonces, recordar el operador definido al final de la sección 3.3, la *helicidad*, dada por (3.29). Esta magnitud, correspondiente a la proyección del pseudoespín en la dirección del momento \mathbf{q} , es una constante de movimiento. Y, recordando que los estados de conducción tienen helicidad $+\hbar$ y los estados de valencia tienen helicidad $-\hbar$, vemos que la acción de la luz sobre los electrones **cambia su helicidad**.

4.3. Comportamiento de las integrales $I_{b,\nu}^{a,\nu'}(q, l)$

En esta sección estudiaremos con más detalle los coeficientes $I_{b,\nu}^{a,\nu'}(q, l)$ presentes en los elementos de matriz. Estos coeficientes, definidos en la ecuación (4.14), consisten en la integral de tres funciones de Bessel con distintos índices. Los posibles valores para a y b presentes en los elementos de matriz son m y $m + l$, m y $m - l$, $m + 1$ y $m + 1 + l$, $m + 1$ y $m + 1 - l$. Estudiaremos de forma numérica el comportamiento de la integral $I_{m+l,\nu'}^{m,\nu}(q, l)$,

que tiene la forma:

$$I_{m+l,\nu'}^{m,\nu}(q, l) = N_{m,\nu} N_{m+1,\nu'} r_0^2 \int_0^1 x J_a(x_{m\nu} x) J_l(qr_0 x) J_b(x_{m+1,\nu'} x) dx.$$

A partir de ahora tomaremos, para mayor simplicidad, $q = r_0 = 1$, pues se trata de constantes que hablan sobre las dimensiones del problema y sólo modifican globalmente el valor de la integral, de la misma manera para cualquier valor de los otros índices, por lo que no son necesarios para entender de forma cualitativa el comportamiento de la misma.

Podemos ver, por ejemplo, el valor de la integral en función de ν para valores fijos de las otras variables, siendo $m = 20$, $\nu' = 60$ y $l = 15$, que se muestra en la figura 4.1. La gráfica

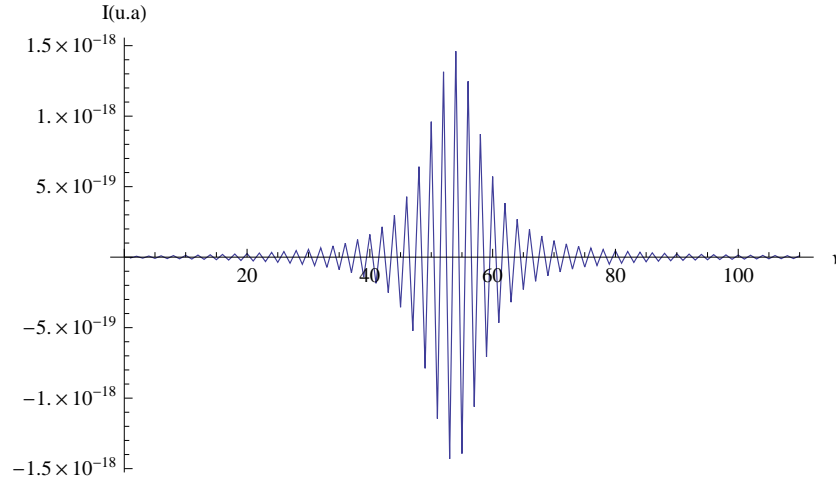


Figura 4.1: Resultado numérico de la integral $I_{20+15,60}^{20,\nu}(1, 15)$ en función de ν .

mostrada en la figura 4.1 muestra la forma general de la integral en función de ν , y aunque se ha mostrado un caso particular, esta forma se mantiene al variar los coeficientes que se dejaron fijos. Si bien la integral muestra una oscilación rápida con el valor de ν , existe una campana envolvente que presenta un pico y luego decae cuando los valores de ν se alejan del mismo. En la sección anterior se encontró que existe una regla de selección clara para los índices m y m' , que resulta de una delta de Kronecker. Si bien para los índices ν y ν' no se encontró ninguna regla de selección, en la figura 4.2 se muestra el valor absoluto de la integral, donde se aprecia que la misma presenta un valor de ν , que llamaremos ν_{max} , para el cual la integral (y por lo tanto el *elemento de matriz*) es máxima, y que existe un

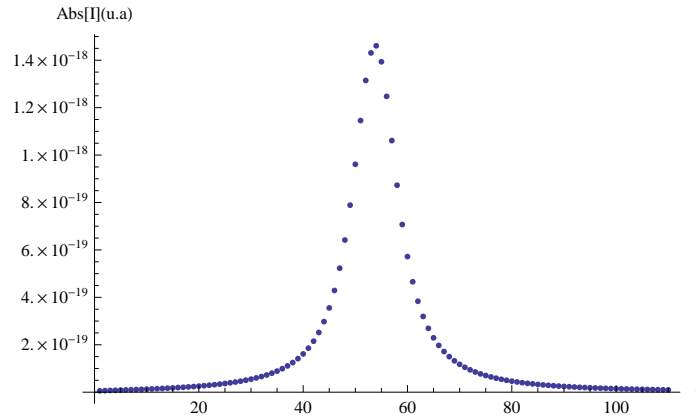


Figura 4.2: Resultado numérico del valor absoluto la integral $I_{20+15,60}^{20,\nu}(1, 15)$ en función de ν .

ancho típico Δ que determina qué tan abruptamente la integral decae a cero. Esto significa que, si bien no hay ninguna delta de Kronecker del tipo $\delta_{\nu,\nu_{max}}$, la mayoría de los valores finales ν' dan una contribución nula (o al menos despreciable) a los elementos de matriz, y en las magnitudes físicas que impliquen sumas sobre todos los posibles valores finales ν' no habrá que sumar infinitas contribuciones, sino sólo unas pocas centradas alrededor de ν_{max} , con un ancho caracterizado por Δ . Observando la campana puede notarse que ν_{max} toma un valor cercano a ν' , pero que **no coincide** con su valor. La campana que se muestra en la figura 4.2 puede ajustarse por una función Lorentziana, y de esa manera determinarse numéricamente los valores para ν_{max} y Δ .

En la figura 4.3 se muestra la forma en la que varía ν_{max} para $l = 5$ fijo, para m entre 1 y 70, y ν' entre 60 y 150. Se observa, como ya se mencionó, que ν_{max} aumenta con ν' , si bien no toma exactamente ese valor. Además, dicho valor se muestra aproximadamente constante al variar m . Para visualizar con más detalle la forma de la dependencia, se muestra en la figura 4.4 el caso de $\nu' = 80$. En la figura se observa cómo la variación de ν_{max} con m es muy pequeña, y se mantiene cercana a un valor levemente menor que ν' .

En cuanto al ancho característico Δ , éste disminuye cuando aumenta m , pero crece al aumentar ν' , como puede observarse en la figura 4.5, donde se muestra Δ en función de m y ν' , nuevamente para $l = 5$. Se observa sin embargo que dicho crecimiento es menos pronunciado para m chicos, zona en la que se observa un achatamiento. Nuevamente se muestra el caso de $\nu' = 80$ en función de m para observar con mayor claridad la forma funcional (figura 4.6).

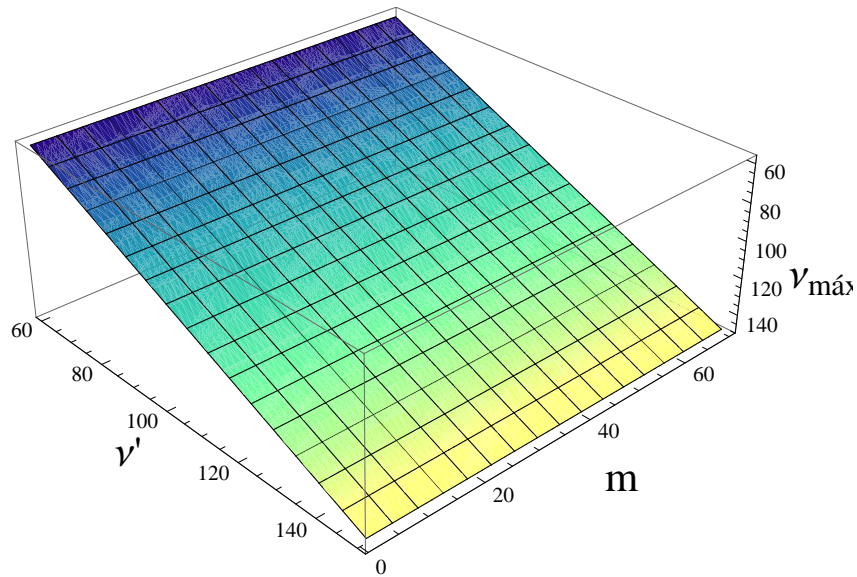


Figura 4.3: Valor del $\nu_{\text{máx}}$ en función de ν' y m , para $l = 5$.

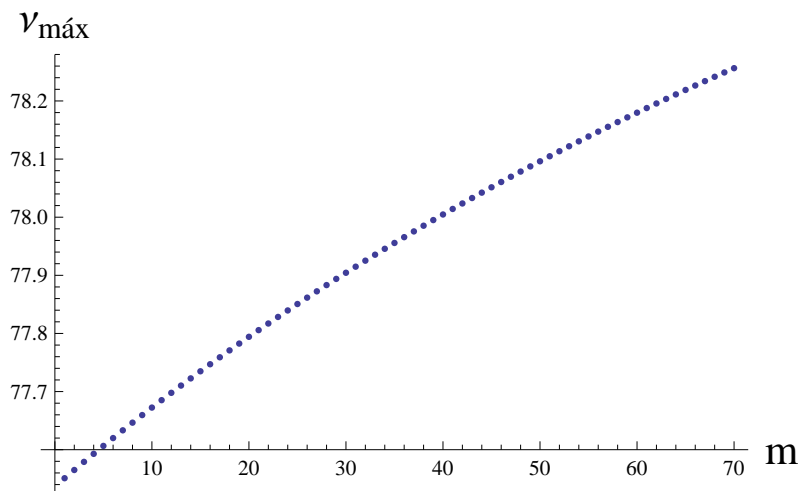


Figura 4.4: Valor del ν máximo en función de m , para $\nu' = 80$ y $l = 5$.

Por último, para finalizar el estudio cualitativo del comportamiento de la integral, queda ver cómo varían los parámetros al modificar el l de la luz incidente. Las formas funcionales encontradas hasta el momento se repiten, pero para m y ν' fijos, Δ y $\nu_{\text{máx}}$ varían con l . La forma en la que varían se muestra en las figuras 4.7 y 4.8, para los valores fijos $m = 50$ y

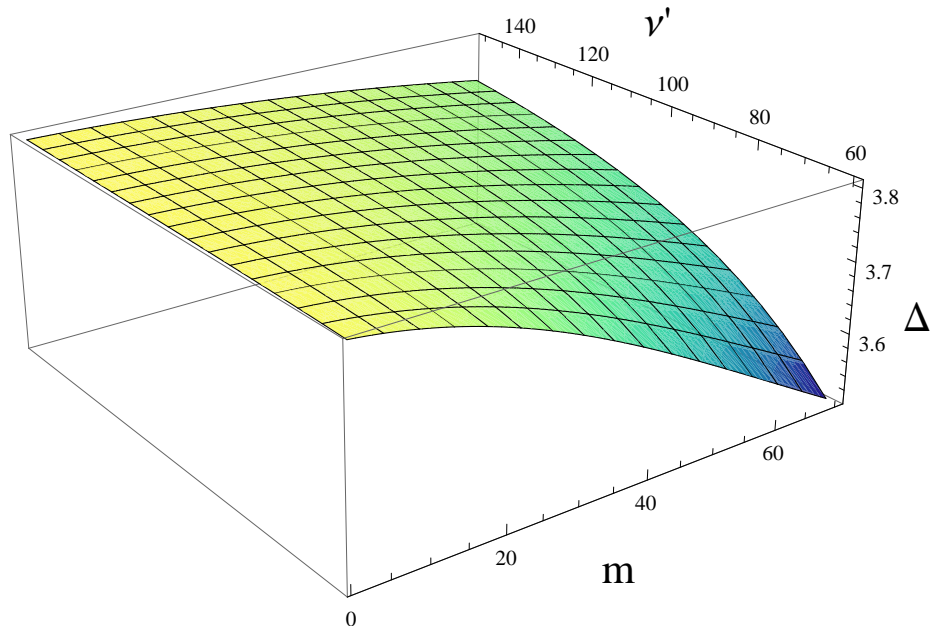


Figura 4.5: Valor de Δ en función de ν' y m , para $l = 5$.

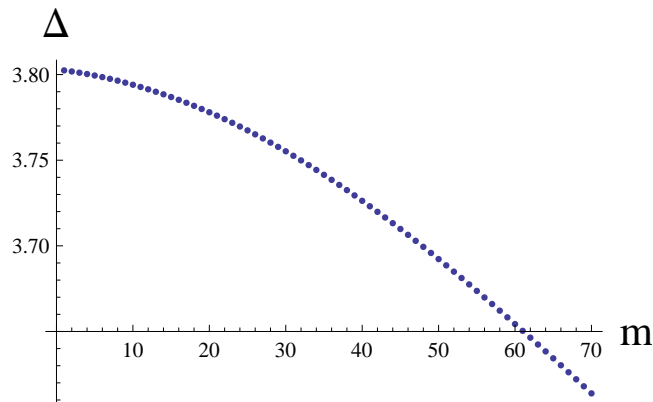


Figura 4.6: Valor de Δ en función de m , para $\nu' = 80$ y $l = 5$.

$\nu' = 80$, con l variando entre 2 y 90. Se observa que el ancho característico Δ aumenta al aumentar l , de manera aproximadamente lineal (figura 4.7). El valor del pico, en cambio, disminuye, corriéndose hacia la izquierda desde el valor de ν' a medida que aumenta l . El valor máximo de ν es, entonces, cercano a ν' para valores chicos de l , y disminuye a medida que l aumenta (ver figura 4.8, donde $\nu' = 80$).

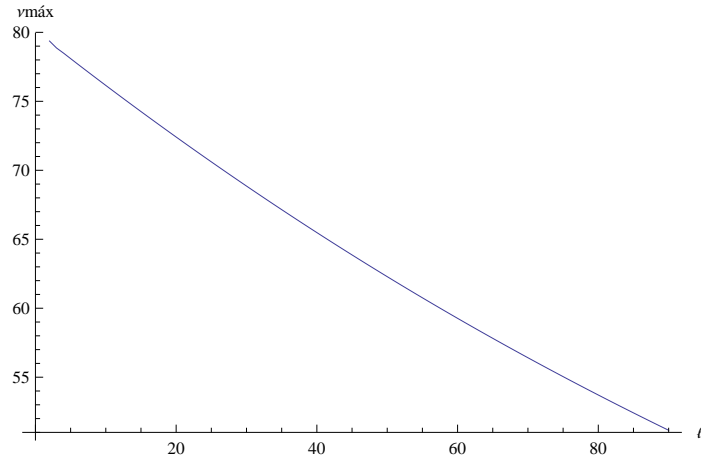


Figura 4.7: Valor para ν_{max} en función de l , para $m = 50$ y $\nu' = 80$.

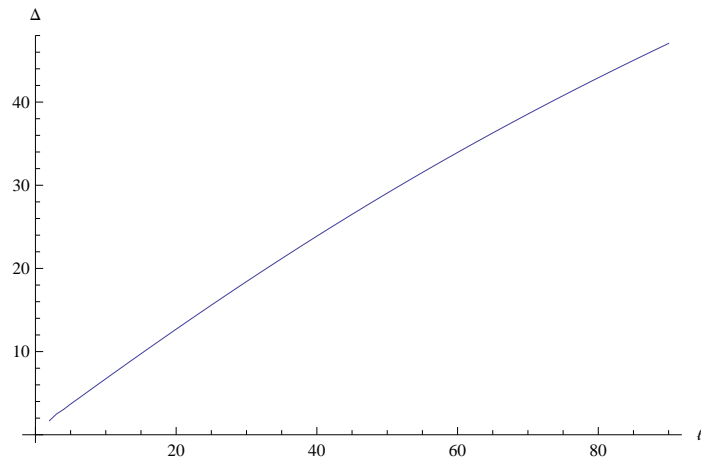


Figura 4.8: Valor para Δ en función de l , para $m = 50$ y $\nu' = 80$.

Las cantidades físicas que calcularemos en las secciones siguientes estarán determinadas por los elementos de matriz, en cuya expresión (4.19) aparecen las integrales I . Por esta razón, el estudio del comportamiento cualitativo de la integral que hemos realizado en esta sección nos permitirá entender con más detalle los resultados obtenidos.

Cabe aclarar que esta dispersión que hemos encontrado en los valores finales posibles para ν **no está relacionada con el momento angular de la luz**, sino sencillamente con la utilización de un haz real, es decir, un haz con un ancho definido y no una onda plana. Si utilizáramos un haz Gaussiano o de Bessel para $l = 0$ **también encontraríamos la dispersión en ν** .

4.4. Planteo en segunda cuantización y ecuaciones de movimiento

Es posible escribir el Hamiltoniano total del sistema en segunda cuantización. Comenzamos con H_0 , el Hamiltoniano del sistema de grafeno no interactuante, en el modelo de *tight binding* a primeros vecinos. (Nuevamente, para facilitar la notación, sólo utilizaremos las tildes para los operadores en los casos en los que sea necesario realizar una distinción.)

$$\begin{aligned}
 H_0^\alpha &= \sum_{\lambda, m, \nu} \epsilon_{\lambda m \nu \alpha} a_{\lambda m \nu}^{\alpha \dagger} a_{\lambda m \nu}^\alpha \\
 &= \sum_{m \nu} (\epsilon_{c m \nu \alpha} a_{c m \nu}^{\alpha \dagger} a_{c m \nu}^\alpha + \epsilon_{v m \nu \alpha} a_{v m \nu}^{\alpha \dagger} a_{v m \nu}^\alpha) \\
 &= \hbar \omega_f \sum_{m, \nu} q_{m, \nu} (a_{c m \nu \alpha}^{\alpha \dagger} a_{c m \nu}^\alpha - a_{v m \nu \alpha}^{\alpha \dagger} a_{v m \nu}^\alpha)
 \end{aligned}$$

donde $a_{\lambda m \nu}^{\alpha \dagger}$ ($a_{\lambda m \nu}^\alpha$) crea (destruye) una partícula en la banda λ cerca del punto de Dirac α .

Para el término de interacción con luz con momento angular orbital, consideramos despreciables los elementos de matriz que conectan estados dentro de la misma banda (es decir, transiciones intrabanda):

$$H_{int}^\alpha = \sum_{\sigma} \sum_{m \nu, m' \nu'} \left[\langle c m' \nu' \alpha | H_{int}^\alpha(\sigma) | v m \nu \alpha \rangle a_{c m' \nu'}^{\alpha \dagger} a_{v m \nu}^\alpha + \langle v m' \nu' \alpha | H_{int}^\alpha(\sigma) | c m \nu \alpha \rangle a_{v m' \nu'}^{\alpha \dagger} a_{c m \nu}^\alpha \right]$$

A partir de ahora dejaremos de lado el índice α para facilitar la notación, pero debe tenerse presente que existe una dependencia con el punto de Dirac para los elementos de matriz y para los operadores, que crean o destruyen electrones en un valle α (cerca de un determinado punto de Dirac).

Consideramos entonces el operador matriz densidad, definido en la sección 2.2.4, $\hat{\rho}_{\lambda' m' \nu', \lambda m \nu} = a_{\lambda' m' \nu'}^\dagger a_{\lambda m \nu}$, que nos dará información sobre la dinámica de los electrones fotoexcitados. Para ello queremos calcular la ecuación de movimiento para este operador en la representación de Heisenberg:

$$i \hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}_{\lambda' m' \nu', \lambda m \nu} = [\hat{\rho}_{\lambda' m' \nu', \lambda m \nu}, H] \quad (4.20)$$

Para calcular el conmutador necesario, entonces, será útil separarlo en el conmutador con H_0

y con H_{int} . Para ambos casos resultará de utilidad la siguiente identidad:

$$[a_1^\dagger a_2, a_3^\dagger a_4] = a_1^\dagger a_4 \delta_{2,3} - a_3^\dagger a_2 \delta_{1,4} \quad (4.21)$$

donde a^\dagger (a) son operadores de creación (destrucción) para fermiones, es decir que cumplen las relaciones canónicas de anticonmutación.

Con ayuda de la identidad de la ecuación 4.21, es necesario calcular tres conmutadores diferentes para obtener las ecuaciones de movimiento buscadas. Los términos correspondientes al conmutador con H_0 son:

$$\begin{aligned} \left[a_{\lambda'm'\nu'}^\dagger a_{\lambda m \nu}, a_{cn\mu}^\dagger a_{cn\mu} \right] &= a_{\lambda'm'\nu'}^\dagger a_{cn\mu} \delta_{\lambda,c} \delta_{m,n} \delta_{\nu,\mu} - a_{cn\mu}^\dagger a_{\lambda m \nu} \delta_{\lambda',c} \delta_{m',n} \delta_{\nu',\mu} \\ \left[a_{\lambda'm'\nu'}^\dagger a_{\lambda m \nu}, a_{vn\mu}^\dagger a_{vn\mu} \right] &= a_{\lambda'm'\nu'}^\dagger a_{vn\mu} \delta_{\lambda,v} \delta_{m,n} \delta_{\nu,\mu} - a_{vn\mu}^\dagger a_{\lambda m \nu} \delta_{\lambda',v} \delta_{m',n} \delta_{\nu',\mu} \end{aligned} \quad (4.22)$$

donde en H_0 se suma sobre los índices n y μ , n' , μ' . Los términos correspondientes a H_{int} son:

$$\begin{aligned} \left[a_{\lambda'm'\nu'}^\dagger a_{\lambda m \nu}, a_{cn'\mu'}^\dagger a_{vn\mu} \right] &= a_{\lambda'm'\nu'}^\dagger a_{vn\mu} \delta_{\lambda,c} \delta_{m,n'} \delta_{\nu,\mu'} - a_{cn'\mu'}^\dagger a_{\lambda m \nu} \delta_{\lambda',v} \delta_{m',n} \delta_{\nu',\mu} \\ \left[a_{\lambda'm'\nu'}^\dagger a_{\lambda m \nu}, a_{vn'\mu'}^\dagger a_{cn\mu} \right] &= a_{\lambda'm'\nu'}^\dagger a_{cn\mu} \delta_{\lambda,v} \delta_{m,n'} \delta_{\nu,\mu'} - a_{vn'\mu'}^\dagger a_{\lambda m \nu} \delta_{\lambda',c} \delta_{m',n} \delta_{\nu',\mu} \end{aligned} \quad (4.23)$$

donde en H_{int} se suma sobre los índices n y μ .

Escribimos entonces la expresión para las ecuaciones de movimiento. Para ello consideramos la evolución de tres tipos de operadores densidad: $\hat{\rho}_{cm'\nu',cm\nu}$, $\hat{\rho}_{vm'\nu',vm\nu}$ y $\hat{\rho}_{vm'\nu',cm\nu}$ (coherencias interbanda). Entonces, usando la expresión para $H_\sigma = H_0 + H_{int}(\sigma)$ en la ecuación de movimiento 4.20, obtenemos las ecuaciones de movimiento análogas a las obtenidas

para un semiconductor en la referencia [3]:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}_{cm'\nu',cm\nu} = \hbar v_F (q_{m\nu} - q_{m'\nu'}) \hat{\rho}_{cm'\nu',cm\nu} + \sum_{\sigma} \sum_{n\mu} (\langle cm\nu | H_{int}(\sigma) | vn\mu \rangle \hat{\rho}_{cm'\nu',vn\mu} - \langle vn\mu | H_{int}(\sigma) | cm'\nu' \rangle \hat{\rho}_{vn\mu,cm\nu}) \quad (4.24)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}_{vm'\nu',vm\nu} = \hbar v_F (q_{m'\nu'} - q_{m\nu}) \hat{\rho}_{vm'\nu',vm\nu} + \sum_{\sigma} \sum_{n\mu} (\langle vm\nu | H_{int}(\sigma) | cn\mu \rangle \hat{\rho}_{vm'\nu',cn\mu} - \langle cn\mu | H_{int}(\sigma) | vm'\nu' \rangle \hat{\rho}_{cn\mu,vm\nu}) \quad (4.25)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}_{vm'\nu',cm\nu} = \hbar v_F (q_{m'\nu'} + q_{m\nu}) \hat{\rho}_{vm'\nu',cm\nu} + \sum_{\sigma} \sum_{n\mu} (\langle cm\nu | H_{int}(\sigma) | vn\mu \rangle \hat{\rho}_{vm'\nu',vn\mu} - \langle cn\mu | H_{int}(\sigma) | vm'\nu' \rangle \hat{\rho}_{cn\mu,cm\nu}) \quad (4.26)$$

4.5. Régimen de baja excitación

Debido a la imposibilidad de realizar un tratamiento analítico de las ecuaciones de movimiento en la forma en la que se encuentran en las ecuaciones (4.24)–(4.26), consideraremos el caso de baja fotoexcitación, en el cual podremos encarar el problema analíticamente en forma perturbativa. Consideraremos ahora sólo un tipo de polarización circular para la luz incidente, es decir, $H_{int} \equiv H_{int}(\sigma)$.

Como en [3], vamos a considerar las ecuaciones de movimiento para los valores de expectación de los operadores $\hat{\rho}$, tomados sobre el estado inicial del material. Notaremos estos valores medios como $\rho = \langle \psi(t=0) | \hat{\rho} | \psi(t=0) \rangle$, y éstos cumplen que $\rho_{\lambda'm'\nu',\lambda m\nu} = \rho_{\lambda m\nu,\lambda'm'\nu'}^*$. Estos valores medios representan poblaciones cuando tienen índices repetidos, y coherencias cuánticas cuando son elementos de matriz de fuera de la diagonal. Los estados iniciales sobre los que se tome valor medio corresponderán a la banda de valencia completamente llena y la banda de conducción completamente vacía, puesto que la energía de Fermi para el grafeno es $\epsilon_F = 0$ [5].

Vamos a resolver entonces las ecuaciones (4.24)–(4.26) utilizando un método iterativo. Es decir, en primer lugar resolveremos la ecuación (4.26) utilizando las coherencias intrabanda a orden cero en el potencial vector. Asumimos que las poblaciones de las dos bandas a orden cero están dadas por distribuciones de Fermi-Dirac (aproximación de cuasi-equilibrio), es

decir:

$$\begin{aligned}\rho_{vm'\nu',vm\nu}^{(0)} &\equiv \rho_{v,m'\nu',m\nu}^{(0)} = \delta_{m,m'}\delta_{\nu,\nu'}f_{v,m\nu} \\ \rho_{cm'\nu',cm\nu}^{(0)} &\equiv \rho_{c,m'\nu',m\nu}^{(0)} = \delta_{m,m'}\delta_{\nu,\nu'}f_{c,m\nu}\end{aligned}\quad (4.27)$$

donde $f_{\lambda,m\nu}$ es la función de Fermi-Dirac para la banda λ . Si además consideramos que las temperaturas son bajas comparadas con la temperatura de Fermi del sistema, y recordando que la energía de Fermi para el grafeno es $\epsilon_F = 0$, se tiene que a orden cero en el potencial vector, la banda de valencia está completamente llena (en los dos puntos de Dirac) y la banda de conducción completamente vacía, es decir, $f_{v,m\nu} \equiv 1$ y $f_{c,m\nu} \equiv 0$, por lo que tomamos:

$$\begin{aligned}\rho_{v,m'\nu',m\nu}^{(0)} &= \delta_{m,m'}\delta_{\nu,\nu'} \\ \rho_{c,m'\nu',m\nu}^{(0)} &= 0.\end{aligned}\quad (4.28)$$

Utilizando la expresión para los elementos intrabanda dados por (4.28) en la ecuación de movimiento para la coherencia interbanda (4.26), se tiene:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\rho_{vm'\nu',cm\nu}^{(1)} = \hbar v_F(q_{m'\nu'} + q_{m\nu})\rho_{vm'\nu',cm\nu}^{(1)} + \sum_{n\mu} \langle cm\nu | H_{int}(\sigma) | vn\mu \rangle \delta_{m'n} \delta_{\nu'\mu}.$$

De este modo obtenemos la ecuación de movimiento para la polarización interbanda a primer orden en el potencial vector:

$$\left[i\hbar\frac{d}{dt} - \hbar v_F(q_{m'\nu'} + q_{m\nu}) \right] \rho_{vm'\nu',cm\nu}^{(1)} = \langle cm\nu | H_{int}(\sigma) | vm'\nu' \rangle. \quad (4.29)$$

La solución de la ecuación (4.29) es de la forma:

$$\rho_{v,m'\nu',cm,\nu} = \beta e^{-i(\epsilon_{cm\nu} - \epsilon_{vm'\nu'})t/\hbar} + e^{-i(\epsilon_{cm\nu} - \epsilon_{vm'\nu'})t/\hbar} g(t).$$

con:

$$\begin{aligned}g(t) &= -\frac{i}{\hbar} \langle cm\nu | H_{int}^0(\sigma) | vm'\nu' \rangle \int_0^t dt' e^{i[(\epsilon_{cm,\nu} - \epsilon_{vm'\nu'}) - \hbar\omega]t'/\hbar} \\ &= -\langle cm\nu | H_{int}^0(\sigma) | vm'\nu' \rangle \frac{e^{i[(\epsilon_{cm\nu} - \epsilon_{vm'\nu'}) - \hbar\omega]t/\hbar} - 1}{(\epsilon_{cm\nu} - \epsilon_{vm'\nu'}) - \hbar\omega},\end{aligned}$$

donde, en la última ecuación, definimos $\langle c, m, \nu | H_{int}^0(\sigma) | vm', \nu' \rangle$ como la parte independiente del tiempo de $\langle c, m, \nu | H_{int}(\sigma) | vm', \nu' \rangle$, es decir, en este caso, recordando la forma general de los elementos de matriz dada por (4.17) y (4.18), y en la RWA:

$$\langle cm\nu | H_{int}(\sigma) | vm'\nu' \rangle = e^{-i\omega t} \langle cm\nu | H_{int}^0(\sigma) | vm'\nu' \rangle.$$

La condición inicial a $t = 0$, $\rho_{vm'\nu', cm\nu}(0) = 0$ resulta en $\beta = 0$, de manera que la solución para la polarización interbanda al orden más bajo (primer orden en A_0) es:

$$\begin{aligned} \rho_{vm'\nu', cm\nu}^{(1)} &= -\frac{1 - e^{-i[v_F(q_{m\nu} + q_{m'\nu'}) - \omega]t}}{\hbar v_F(q_{m\nu} + q_{m'\nu'}) - \hbar\omega} \langle cm\nu | H_{int}(\sigma) | vm'\nu' \rangle \\ &\equiv Y_{m\nu, m'\nu'}(t) \langle cm\nu | H_{int}(\sigma) | vm'\nu' \rangle. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Teniendo la solución a primer orden para las coherencias interbanda $\rho_{vm'\nu', cm\nu}^{(1)}$, podemos volver a las ecuaciones (4.24) y (4.25) y obtener una solución para las coherencias o poblaciones intrabandas a segundo orden en el potencial vector. Por ejemplo, para $\rho_{c, m'\nu', m\nu}^{(2)}$:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{cm'\nu', cm\nu}^{(2)} &= \hbar v_F(q_{m\nu} - q_{m'\nu'}) \rho_{cm'\nu', cm\nu}^{(2)} + \\ &+ \sum_{n\mu} \left(\langle cm\nu | H_{int}(\sigma) | vn\mu \rangle \rho_{cm'\nu', vn\mu}^{(1)} - \langle vn\mu | H_{int}(\sigma) | cm'\nu' \rangle \rho_{vn\mu, cm\nu}^{(1)} \right), \end{aligned}$$

y de forma análoga para $\rho_{v, m'\nu', m\nu}^{(2)}$, de modo que:

$$\begin{aligned} \left[i\hbar \frac{d}{dt} - \hbar v_F(q_{m, \nu} - q_{m', \nu'}) \right] \rho_{cm'\nu', cm\nu}^{(2)} &= \sum_{n\mu} \langle cm\nu | H_{int}(\sigma) | vn\mu \rangle \langle vn\mu | H_{int}(\sigma) | cm'\nu' \rangle \times \\ &\times [Y_{n\mu, m'\nu'}^*(t) - Y_{m\nu, n\mu}(t)] \\ \left[i\hbar \frac{d}{dt} - \hbar v_F(q_{m'\nu'} - q_{m\nu}) \right] \rho_{vm'\nu', vm\nu}^{(2)} &= \sum_{n\mu} \langle vm\nu | H_{int}(\sigma) | cn\mu \rangle \langle cn\mu | H_{int}(\sigma) | vm'\nu' \rangle \times \\ &\times [Y_{m'\nu', n\mu}(t) - Y_{n\mu, m\nu}^*(t)]. \end{aligned}$$

Podemos encontrar la solución a estas ecuaciones de manera análoga a lo hecho para (4.29). Para la banda de valencia, elegimos $\rho_{v, m', \nu', v, m, \nu}(t) = e^{-iv_F(q_{m', \nu'} - q_{m, \nu})t} g_v(t)$, y la ecuación

para $g_v(t)$ resulta:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}g_v(t) &= -\frac{i}{\hbar}e^{-iv_F(q_{m',\nu'}-q_{m,\nu})t} \times \\ &\times \sum_{n,\mu} \langle vm\nu | H_{int}^0(\sigma) | cm\nu_1 \rangle \langle cm\nu_1 | H_{int}^0(\sigma) | vm'\nu' \rangle [Y_{n\mu,m'\nu'}(t) - Y_{m\nu,n\mu}^*(t)], \end{aligned}$$

recordando que, debido a su dependencia temporal, $\langle vm\nu | H_{int}(\sigma) | cm\nu_1 \rangle \langle cm\nu_1 | H_{int}(\sigma) | vm'\nu' \rangle = \langle vm\nu | H_{int}^0(\sigma) | cm\nu_1 \rangle(t) \langle cm\nu_1 | H_{int}^0(\sigma) | vm'\nu' \rangle(t)$.

$$\begin{aligned} g_v(t) &= g_v(0) - \frac{i}{\hbar} \sum_{n\mu} \langle vm\nu | H_{int}^0(\sigma) | cn\mu \rangle \langle cn\mu | H_{int}^0(\sigma) | vm'\nu' \rangle \times \\ &\times \int_0^t dt' e^{iv_F(q_{m'\nu'}-q_{m,\nu})t'} [Y_{n\mu,m'\nu'}(t') - Y_{m\nu,n\mu}^*(t')], \end{aligned}$$

donde la condición inicial es $\rho_{vm\nu',vm\nu}(0) = \delta_{m'\nu',m\nu}$; entonces, $g_v(0) = \delta_{m',m}\delta_{\nu',\nu}$. Entonces, la solución a segundo orden en A_0 para la polarización intrabanda, en el caso de la banda de valencia, es:

$$\begin{aligned} \rho_{vm\nu',vm\nu}^{(2)}(t) &= \delta_{m',m}\delta_{\nu',\nu} - \frac{i}{\hbar}e^{-iv_F(q_{m'\nu'}-q_{m,\nu})t} \\ &\times \sum_{n\mu} \langle vm\nu | H_{int}(\sigma) | cn\mu \rangle \langle cn\mu | H_{int}(\sigma) | vm'\nu' \rangle \\ &\times \int_0^t dt' e^{iv_F(q_{m'\nu'}-q_{m,\nu})t'} [Y_{n\mu,m'\nu'}(t') - Y_{m\nu,n\mu}^*(t')]. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Para la polarización intrabanda correspondiente a la banda de conducción, el cálculo es completamente análogo, utilizando la condición inicial $\rho_{c,m',\nu';v,m,\nu}(0) = 0$, de modo que $g_c(0) = 0$, y la polarización a segundo orden es:

$$\begin{aligned} \rho_{vm\nu',vm\nu}^{(2)}(t) &= -\frac{i}{\hbar}e^{-iv_F(q_{m,\nu}-q_{m',\nu'})t} \sum_{n\mu} \langle cm\nu | H_{int}(\sigma) | vn\mu \rangle \langle vn\mu | H_{int}(\sigma) | cm'\nu' \rangle \\ &\times \int_0^t dt' e^{iv_F(q_{m\nu}-q_{m',\nu'})t'} [Y_{n\mu,m'\nu'}^*(t') - Y_{m\nu,n\mu}(t')]. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Entonces, tenemos expresiones para las coherencias al orden más bajo no trivial, que resulta ser a orden A_0 para las coherencias interbanda, y a orden A_0^2 para las poblaciones y las

coherencias interbanda. Para calcular estas últimas, necesitamos obtener el producto de dos elementos de matriz. Utilizando la forma general para los mismos en la RWA dados por (4.19), tenemos (notemos que por tratarse de un producto de dos elementos de matriz, desaparece la dependencia en α , por lo que omitimos ese índice para simplificar la notación):

$$\begin{aligned}
 \langle cm\nu | H_{int}^+ | vn\mu \rangle \langle vn\mu | H_{int}^+ | cm'\nu' \rangle &= 4e^2 v_F^2 A_0^2 \delta_{m,m'} \delta_{n,m-(l+1)} I_{m,\nu}^{m-l,\mu} I_{m,\nu'}^{m-l,\mu} \\
 \langle cm\nu | H_{int}^- | vn\mu \rangle \langle vn\mu | H_{int}^- | cm'\nu' \rangle &= 4e^2 v_F^2 A_0^2 \delta_{m,m'} \delta_{n,m-(l-1)} I_{m+1,\nu}^{m+1-l,\mu} I_{m+1,\nu'}^{m+1-l,\mu} \\
 \langle vm\nu | H_{int}^+ | cn\mu \rangle \langle cn\mu | H_{int}^+ | vm'\nu' \rangle &= 4e^2 v_F^2 A_0^2 \delta_{m,m'} \delta_{n,m+(l+1)} I_{m+1,\nu}^{m+1+l,\mu} I_{m+1,\nu'}^{m+1+l,\mu} \\
 \langle vm\nu | H_{int}^- | cn\mu \rangle \langle cn\mu | H_{int}^- | vm'\nu' \rangle &= 4e^2 v_F^2 A_0^2 \delta_{m,m'} \delta_{n,m+(l-1)} I_{m+1,\nu}^{m+1+l,\mu} I_{m+1,\nu'}^{m+1+l,\mu}, \quad (4.33)
 \end{aligned}$$

donde H_{int}^+ hace referencia a luz con polarización circular izquierda ($\sigma = 1$), y H_{int}^- a luz circular derecha ($\sigma = -1$), y hemos dejado implícita la dependencia con q y l de las integrales, es decir, $I_b^a \equiv I_b^a(q, l)$. Con estas expresiones podemos calcular, a modo de ejemplo, las poblaciones para la banda de conducción y de valencia. Para la banda de conducción, según la ecuación (4.32), se tiene:

$$n_{cm\nu}^{(2)}(t) = \frac{-i}{\hbar} \sum_{n,\mu} \langle cm\nu | H_{int} | vn\mu \rangle \langle vn\mu | H^{int} | cm\nu \rangle \int_0^t [Y_{cn\mu,vm\nu}^*(t') - Y_{cn\mu,vm\nu}(t')], \quad (4.34)$$

donde $Y_{cn\mu,vm\nu}(t)$ están definidos en la ecuación (4.30). Realizando la interacción en t' , se obtiene:

$$n_{cm\nu}^{(2)}(t) = \frac{2}{\hbar^2} \sum_{n,\mu} \langle cm\nu | H_{int} | vn\mu \rangle \langle vn\mu | H^{int} | cm\nu \rangle \frac{\{1 - \cos[(v_F(q_{m\nu} + q_{n\mu}) - \omega)t]\}}{[v_F(q_{m\nu} + q_{n\mu}) - \omega]^2}, \quad (4.35)$$

donde se observa una evolución lenta para frecuencias cercanas a $v_F(q_{m\nu} + q_{n\mu}) = (\varepsilon_{cm\nu} - \varepsilon_{vn\mu})/\hbar$, es decir a la frecuencia de *detuning* [8]. Entonces, usando los resultados para el producto de dos elementos de matriz encontrados en la ecuación (4.33), podemos escribir las poblaciones para el sistema estudiado, que resultarán, como ya se ha mencionado, cuadráticas

en A_0 e independientes del punto de Dirac:

$$\begin{aligned} n_{cm\nu}^{(2),(+)}(t) &= \frac{8e^2 v_F^2 A_0^2}{\hbar^2} \sum_{\mu} \frac{(I_{m,\nu}^{m-l,\mu})^2 \{1 - \cos[(v_F(q_{m,\nu} + q_{m-(l+1),\mu}) - \omega)t]\}}{[v_F(q_{m,\nu} + q_{m-(l+1),\mu}) - \omega]^2} \\ n_{cm\nu}^{(2),(-)}(t) &= \frac{8e^2 v_F^2 A_0^2}{\hbar^2} \sum_{\mu} \frac{(I_{m+1,\nu}^{m+1-l,\mu})^2 \{1 - \cos[(v_F(q_{m,\nu} + q_{m-(l-1),\mu}) - \omega)t]\}}{[v_F(q_{m,\nu} + q_{m-(l-1),\mu}) - \omega]^2}, \end{aligned} \quad (4.36)$$

donde queda en evidencia que los términos correspondientes a las transiciones intermedias (la suma en ν) sólo pueden diferenciarse en momento angular del estado del sistema por la cantidad asociada al momento angular de un fotón. Debemos recordar que, si bien no existe dependencia implícita con el índice α , estas poblaciones están asociadas a un determinado punto de Dirac, si se desea obtener la población total debe multiplicarse por el 2 de degeneración de valles.

La población de valencia a orden más bajo no trivial en A_0 queda, de acuerdo a la ecuación (4.31):

$$n_{vm\nu}^{(2)}(t) = 1 - \frac{i}{\hbar} \sum_{n,\mu} \langle v, m, \nu | H_{int} | c, n, \mu \rangle \langle c, n, \mu | H^{int} | v, m, \nu \rangle \int_0^t [Y_{cn\mu,vm\nu}(t') - Y_{cn\mu,vm\nu}^*(t')] dt'. \quad (4.37)$$

De manera análoga a lo realizado para conducción, se obtiene para la población para la banda de valencia para este sistema:

$$\begin{aligned} n_{vm\nu}^{(2),(+)}(t) &= 1 - \frac{8e^2 v_F^2 A_0^2}{\hbar^2} \sum_{\mu} \frac{(I_{m+1,\nu}^{m+1+l,\mu})^2 \{1 - \cos[(v_F(q_{m,\nu} + q_{m+(l+1),\mu}) - \omega)t]\}}{[v_F(q_{m,\nu} + q_{m+(l+1),\mu}) - \omega]^2} \\ n_{vm\nu}^{(2),(-)}(t) &= 1 - \frac{8e^2 v_F^2 A_0^2}{\hbar^2} \sum_{\mu} \frac{(I_{m,\nu}^{m+l,\mu})^2 \{1 - \cos[(v_F(q_{m,\nu} + q_{m+(l-1),\mu}) - \omega)t]\}}{[v_F(q_{m,\nu} + q_{m+(l-1),\mu}) - \omega]^2}, \end{aligned} \quad (4.38)$$

4.6. Dinámica de los electrones foto-excitados

La excitación de sólidos mediante haces de *twisted light* produce una dinámica de portadores dependiente de las coordenadas espaciales, cuya descripción requiere la utilización de variables locales. Para visualizar el movimiento de los electrones foto-excitados, calcularemos en esta sección la densidad de corriente, inhomogénea en el espacio. Calcularemos, además, la

transferencia de momento angular, que es una magnitud global que caracteriza la interacción del material con la *twisted light*. Utilizaremos los resultados para la matriz densidad hallados en el capítulo anterior, y trabajaremos al orden más bajo no trivial, es decir, hasta orden cuadrático en la amplitud del campo incidente. La utilización del formalismo de ecuaciones de movimiento de Heisenberg para las poblaciones y coherencias permite el tratamiento de un sistema en el cual se excitan múltiples electrones, y tiene la ventaja de poder extenderse eventualmente para incluir interacción entre electrones.

Estudiaremos separadamente las contribuciones al momento angular y a la corriente eléctrica correspondientes a las coherencias interbanda, por un lado, y a las poblaciones y coherencias intrabandas, por el otro. Esta separación resulta conceptualmente útil ya que en la sección anterior se ha observado que las coherencias interbanda tienen una dependencia temporal oscilatoria rápida (del orden de los femtosegundos) alrededor de un valor nulo, mientras que las poblaciones y las coherencias intrabanda tienen una dependencia temporal lenta cerca del *detuning*. Se espera que estas dependencias temporales de las coherencias se reflejen en la corriente eléctrica y en la transferencia de momento angular.

4.6.1. Transferencia de momento angular

Para estudiar la transferencia de momento angular a los electrones, escribimos los operadores de momento angular para el sistema de muchas partículas que estamos estudiando, en el formalismo de segunda cuantización. Para ello consideramos los operadores de momento angular orbital y de momento angular total para un electrón, definidos en la sección 3.3. Consideramos primero el **momento angular total**. Al ser diagonal en la base de estados elegido, es fácil escribirlo en el formalismo de segunda cuantización, como se estudió en la sección 2.2:

$$\hat{J}_z^\alpha = \sum_{\lambda m \nu} \left(m + \frac{1}{2} \right) a_{\lambda m \nu}^{\alpha \dagger}(t) a_{\lambda m \nu}^\alpha(t).$$

Tomando ahora valor medio sobre el estado inicial, al igual que en las secciones anteriores, obtenemos la evolución temporal para el momento angular total:

$$J_z(t) = 2 \sum_{\lambda m \nu} \left(m + \frac{1}{2} \right) n_{\lambda m \nu}^{(2)}(t). \quad (4.39)$$

En la ecuación (4.39) hemos realizado la suma sobre el índice α que resulta en un 2 de degeneración de valle, puesto que sólo aparecen contribuciones de poblaciones, que, como ya hemos visto, son cuadráticos en A_0 y no dependen del punto de Dirac. Por esta razón, la evolución temporal de $J_z(t)$ es lenta, como hemos visto en la sección 4.5. También se ha dejado implícito un índice σ , ya que las poblaciones dependen de la polarización de la luz incidente.

Podemos, por otra parte, escribir el operador **momento angular orbital** en segunda cuantización. Ya hemos visto que la base utilizada no es autoestado de L_z , de modo que:

$$\hat{L}_z^\alpha(t) = \sum_{\lambda m \nu} \sum_{\lambda' m' \nu'} \langle \lambda m \nu \alpha | L_z | \lambda' m' \nu' \alpha \rangle a_{\lambda m \nu}^{\alpha\dagger}(t) a_{\lambda' m' \nu'}^\alpha(t). \quad (4.40)$$

Entonces, es necesario calcular los elementos de matriz del operador L_z . Ya hemos visto en la sección 3.3 la forma en la que este operador actúa sobre los estados, de modo que sólo es necesario realizar integrales de dos funciones ψ , que, utilizando la forma de la normalización para las funciones de Bessel, resulta [6]:

$$\int d\mathbf{r} \psi_{m\nu}^*(r\theta) \psi_{m'\nu'}(r\theta) = \delta_{m,m'} \delta_{\nu,\nu'}$$

Utilizando esta expresión, podemos escribir los elementos de matriz para el operador momento angular orbital:

$$\langle \lambda m \nu \alpha | L_z | \lambda' m' \nu' \alpha \rangle = \frac{\hbar}{2} \delta_{m,m'} \delta_{\nu,\nu'} [(2m+1)\delta_{\lambda,\lambda'} + \alpha(1-\delta_{\lambda,\lambda'})]. \quad (4.41)$$

Utilizando las expresiones para los elementos de matriz en la ecuación (4.40) y tomando valor medio sobre el estado inicial, al igual que en las secciones anteriores, se tiene:

$$\begin{aligned} L_z(t) &= \sum_{m\nu} \left(m + \frac{1}{2} \right) \hbar \left(n_{cm\nu}^{K(2)}(t) + n_{vm\nu}^{K(2)}(t) \right) + \sum_{m\nu} \left(m + \frac{1}{2} \right) \hbar \left(n_{cm\nu}^{K'(2)}(t) + n_{vm\nu}^{K'(2)}(t) \right) \\ &+ \frac{\hbar}{2} \sum_{m\nu} \sum_{\lambda \neq \lambda'} \left(\rho_{\lambda' m \nu, \lambda m \nu}^{K(1)}(t) - \rho_{\lambda' m \nu, \lambda m \nu}^{K'(1)}(t) \right). \end{aligned}$$

Entonces, recordando las expresiones halladas en la sección 4.5, sabemos que las poblaciones no dependen del punto de Dirac, y que las coherencias interbanda son proporcionales a los

elementos de matriz. Por esta razón, por ejemplo:

$$\rho_{\lambda' m \nu, \lambda m \nu}^{K(1)} \propto \delta_{m, m+(l \pm 1)} = 0.$$

De esta manera vemos que el valor medio del momento angular orbital coincide con el del momento angular total:

$$L_z(t) = \sum_{m\nu} (2m+1) \hbar (n_{cm\nu}^{(2)}(t) + n_{vm\nu}^{(2)}(t)) + \hbar \sum_{m\nu} \sum_{\lambda \neq \lambda'} \rho_{\lambda' m \nu, \lambda m \nu}^{(1)}(t) \quad (4.42)$$

$$= 2 \sum_{m\nu} \left(m + \frac{1}{2} \right) \hbar (n_{cm\nu}^{(2)}(t) + n_{vm\nu}^{(2)}(t)), \quad (4.43)$$

lo cual es esperable dados los resultados hallados en la sección 3.3 para los operadores de una partícula en primera cuantización.

Si recordamos la forma de las poblaciones, encontradas en la sección 4.5, dadas por las ecuaciones (4.36) y (4.38), podemos notar que, además de la suma en μ y ν , habrá una suma para μ correspondientes a los estados intermedios. Sin embargo, por la presencia de las integrales estudiadas en la sección 4.3, sabemos que serán pocos los valores de μ que efectivamente aportarán a la sumatoria, e incluso podría aproximarse por el valor ν_{max} donde la integral se hace máxima, función de ν , m y l , multiplicado por el ancho Δ , función también de estos parámetros. Analizando la forma de las poblaciones, vemos que los términos más grandes en la suma sobre m y ν serán aquellos en los que el denominador se haga chico, es decir, para $\hbar\omega \approx \epsilon_{\lambda, m, \nu} - \epsilon_{\lambda, m \pm (l \pm 1), \mu}$: cerca de la resonancia. Estos términos, que serán los más importantes en la suma, evolucionarán en el tiempo con una oscilación **lenta**.

4.6.2. Contribución diamagnética al momento angular

Al momento de escribir el Hamiltoniano para la interacción de luz con materia en la sección 4.1, hemos realizado el cambio $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + e\mathbf{A}$ para que la teoría resulte invariante de gauge. Por esta razón, para que el momento angular sea invariante de gauge, debemos calcularlo como:

$$\mathbf{L}^{tot} = \mathbf{r} \times (\mathbf{p} + e\mathbf{A}). \quad (4.44)$$

De modo que, a lo calculado en la sección anterior, debe agregarse una contribución *diamagnética* para la componente z del momento angular, dada por:

$$\begin{aligned} L_z^{(dia)} &= e (\mathbf{r} \times \mathbf{A})_z \\ &= er [\cos \theta A_y - \sin \theta A_x]. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Escribiendo A_x y A_y según las ecuaciones (4.5) y (4.6), obtenemos:

$$L_z^{(dia)} = ei\sigma A_0 r J_l(qr) [e^{-i\omega t} e^{i(l+\sigma)\theta} - e^{i\omega t} e^{-i(l+\sigma)\theta}]. \quad (4.46)$$

Esta cantidad, como puede observarse, es en sí misma de orden 1 en A_0 . Por esta razón, al momento de escribirla en segunda cuantización, la contribución diamagnética será siempre un orden mayor en A_0 que la contribución paramagnética estudiada en la sección anterior. Es decir, por ejemplo, para la contribución de poblaciones el momento angular paramagnético es cuadrático en A_0 , de modo que el momento angular diamagnético será cúbico en A_0 , y para intensidades pequeñas del campo incidente podremos despreciarlo. El único término diamagnético que debemos tener en cuenta es el correspondiente a la contribución de coherencias, ya que el término paramagnético se anula.

Para calcular la contribución de coherencias del momento angular diamagnético, necesitamos los elementos de matriz de $L_z^{(dia)}$. Cerca del punto \mathbf{K} , por ejemplo, están dados por:

$$\begin{aligned} \langle \lambda' m' \nu' K | L_z^{(dia)} | \lambda m \nu K \rangle &= ei\sigma A_0 [\delta_{m', m+(l+\sigma)} e^{-i\omega t} - \delta_{m', m-(l+\sigma)} e^{i\omega t}] \times \\ &\times \int dr r^2 [J_{m'+1, \nu'}(q_{m'+1, \nu'} r) J_{m+1, \nu}(q_{m+1, \nu} r) J_l(qr) - J_{m', \nu'}(q_{m', \nu'} r) J_{m, \nu}(q_{m, \nu} r) J_l(qr)] \end{aligned} \quad (4.47)$$

Ahora bien, al momento de calcular $L_z^{(dia)}$ en segunda cuantización, debemos sumar sobre todos los m, m', ν y ν' posibles. La suma sobre m' aporta sólo un término a causa de las deltas. Al sumar sobre todo m , es posible pensar que:

$$\sum_{\forall m} \int dr r^2 [J_{m\pm(l+\sigma)+1, \nu'}(q_{m\pm(l+\sigma)+1, \nu'} r) J_{m+1, \nu}(q_{m+1, \nu} r) J_l(qr)] \quad (4.48)$$

$$= \sum_{\forall m} \int dr r^2 [J_{m\pm(l+\sigma), \nu'}(q_{m\pm(l+\sigma), \nu'} r) J_{m, \nu}(q_{m, \nu} r) J_l(qr)]. \quad (4.49)$$

Como uno en verdad no suma nunca para **todo** m , sino en algún intervalo acotado, la expresión anterior sólo es aproximadamente cierta. En verdad, las expresiones difieren en dos

términos, por lo que al hacer la resta obtendremos sólo dos términos, y los despreciaremos en este trabajo.

4.6.3. Corrientes inducidas

Para calcular las corrientes inducidas por la luz en el sistema consideramos, primeramente, el operador corriente en primera cuantización. Para ello, tenemos en cuenta que el Hamiltoniano de interacción escrito en primera cuantización dado por la ecuación (4.3) debe poder escribirse como [7]:

$$H_{int}^{\alpha} = -\mathbf{j}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}, \quad (4.50)$$

de modo que debe ser:

$$\mathbf{j}_{\alpha} = -\alpha e v_F (\sigma_x, -\alpha \sigma_y). \quad (4.51)$$

Escrita en segunda cuantización, la densidad de corriente tendrá la forma:

$$\mathbf{j}_{\alpha} = e v_F \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) (-\alpha \sigma_x, \sigma_y) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}, t), \quad (4.52)$$

donde Ψ_{α} es el operador de campo asociado a los estados del sistema. Este resultado es consistente con la expresión para la corriente obtenida del hamiltoniano de Dirac para fermiones libres [1]. Entonces, escribimos los operadores de campo en la base utilizada en las secciones anteriores:

$$\psi_{\alpha}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\lambda m \nu} \Psi_{\lambda m \nu}^{\alpha}(\mathbf{r}) a_{\lambda m \nu}^{\alpha}(t),$$

donde el operador $a_{\lambda m \nu}^{\alpha}$ ($a_{\lambda m \nu}^{\alpha \dagger}$) destruye (crea) un electrón en la banda λ , en el valle α (es decir, cerca del punto de Dirac \mathbf{K}_{α}), con momento angular total $j_z = (m + 1/2)\hbar$ y energía $E = \pm \hbar v_F q_{m \nu}$. Entonces, el operador densidad de corriente en segunda cuantización expresado en esta base de estados resulta:

$$\mathbf{j}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) = -\alpha e v_F \sum_{\lambda, \lambda'} \sum_{m, m'} \sum_{\nu, \nu'} \Psi_{\lambda m \nu}^{\alpha \dagger}(\mathbf{r}) (\sigma_x, -\alpha \sigma_y) \Psi_{\lambda' m' \nu'}^{\alpha}(\mathbf{r}) a_{\lambda m \nu}^{\dagger \alpha}(t) a_{\lambda' m' \nu'}^{\alpha}(t). \quad (4.53)$$

El carácter vectorial de este operador viene dado por el término correspondiente a las matrices de Pauli, que está expresado en coordenadas cartesianas, es decir:

$$(\sigma_x, -\alpha\sigma_y) \equiv \sigma_x \hat{x} - \alpha\sigma_y \hat{y}.$$

Sin embargo, dada la simetría del problema, y para intentar relacionar la corriente inducida con la transferencia de momento angular, nos interesa estudiar las componentes polares de la corriente, que vendrán dadas por las componentes en \hat{r} y $\hat{\theta}$ de la ecuación anterior, es decir:

$$\sigma_x \hat{x} - \alpha\sigma_y \hat{y} = (\sigma_x \cos \theta - \alpha\sigma_y \sin \theta) \hat{r} + (-\sigma_x \sin \theta - \alpha\sigma_y \cos \theta) \hat{\theta},$$

de modo que las componentes polares de la corriente (4.53) resultan:

$$\begin{aligned} j_{r,\alpha}(\mathbf{r}, t) &= -\alpha e v_F \sum_{\lambda, \lambda'} \sum_{m, m'} \sum_{\nu, \nu'} \Psi_{\lambda m \nu}^{\alpha \dagger}(\mathbf{r}) (\sigma_x \cos \theta - \alpha\sigma_y \sin \theta) \Psi_{\lambda' m' \nu'}^{\alpha}(\mathbf{r}) \rho_{\lambda m \nu, \lambda' m' \nu'}^{\alpha}(t) \\ j_{\theta,\alpha}(\mathbf{r}, t) &= -\alpha e v_F \sum_{\lambda, \lambda'} \sum_{m, m'} \sum_{\nu, \nu'} \Psi_{\lambda m \nu}^{\alpha \dagger}(\mathbf{r}) (-\sigma_x \sin \theta - \alpha\sigma_y \cos \theta) \Psi_{\lambda' m' \nu'}^{\alpha}(\mathbf{r}) \rho_{\lambda m \nu, \lambda' m' \nu'}^{\alpha}(t). \end{aligned}$$

La dependencia espacial de la corriente vendrá dada por el producto de las matrices de Pauli y los espinores definidos en las ecuaciones (3.24) y (3.25) de la sección 3.2, que resultan ser:

$$\begin{aligned} \Psi_{\lambda m \nu}^{K \dagger}(r, \theta) \sigma_x \Psi_{\lambda' m' \nu'}^K(r, \theta) &= -i\lambda' \psi_{m+1, \nu}^*(r, \theta) \psi_{m', \nu'}(r, \theta) + i\lambda \psi_{m, \nu}^*(r, \theta) \psi_{m'+1, \nu'}(r, \theta) \\ \Psi_{\lambda m \nu}^{K \dagger}(r, \theta) \sigma_y \Psi_{\lambda' m' \nu'}^K(r, \theta) &= -\lambda' \psi_{m+1, \nu}^*(r, \theta) \psi_{m', \nu'}(r, \theta) - \lambda \psi_{m, \nu}^*(r, \theta) \psi_{m'+1, \nu'}(r, \theta) \\ \Psi_{\lambda m \nu}^{K' \dagger}(r, \theta) \sigma_x \Psi_{\lambda' m' \nu'}^{K'}(r, \theta) &= -i\lambda' \psi_{m, \nu}^*(r, \theta) \psi_{m'+1, \nu'}(r, \theta) + i\lambda \psi_{m+1, \nu}^*(r, \theta) \psi_{m', \nu'}(r, \theta) \\ \Psi_{\lambda m \nu}^{K' \dagger}(r, \theta) \sigma_y \Psi_{\lambda' m' \nu'}^{K'}(r, \theta) &= -\lambda' \psi_{m, \nu}^*(r, \theta) \psi_{m'+1, \nu'}(r, \theta) - \lambda \psi_{m+1, \nu}^*(r, \theta) \psi_{m', \nu'}(r, \theta), \end{aligned}$$

donde los índices λ, λ' son $+1$ para la banda de conducción y -1 para la banda de valencia; y las funciones de onda $\psi_{m, \nu}(r, \theta)$ fueron definidas en la ecuación (3.20) de la sección 3.2. Utilizando estos resultados, y la posibilidad de intercambiar los índices primados por los índices sin primar al estar sumando sobre todos ellos, se obtiene para la componente \mathbf{r} de la

corriente:

$$\begin{aligned}
 j_{r,\alpha}(\mathbf{r}, t) &= 2ev_F \sum_{m,m'} \sum_{\nu,\nu'} \frac{N_{m+1,\nu} N_{m',\nu'}}{2\pi} J_{m+1}(q_{m+1,\nu} r) J_{m'}(q_{m',\nu'} r) \\
 &\times [\sin[(m' - m)\theta] (\rho_{\nu m \nu, \nu m' \nu'}^\alpha(t) - \rho_{cm \nu, cm' \nu'}^\alpha(t)) \\
 &+ i\alpha \cos[(m' - m)\theta] (\rho_{\nu m \nu, cm' \nu'}^\alpha(t) - \rho_{\nu m \nu, cm' \nu'}^{\alpha*}(t))].
 \end{aligned} \tag{4.54}$$

Para la componente en $\hat{\theta}$ se tiene:

$$\begin{aligned}
 j_{\theta,\alpha}(\mathbf{r}, t) &= 2ev_F \sum_{m,m'} \sum_{\nu,\nu'} \frac{N_{m+1,\nu} N_{m',\nu'}}{2\pi} J_{m+1}(q_{m+1,\nu} r) J_{m'}(q_{m',\nu'} r) \\
 &\times [\cos[(m' - m)\theta] (\rho_{\nu m \nu, \nu m' \nu'}^\alpha(t) - \rho_{cm \nu, cm' \nu'}^\alpha(t)) \\
 &- i\alpha \sin[(m' - m)\theta] (\rho_{\nu m \nu, cm' \nu'}^\alpha(t) - \rho_{\nu m \nu, cm' \nu'}^{\alpha*}(t))].
 \end{aligned} \tag{4.55}$$

Para estudiar las corrientes inducidas con más detalle, separaremos la contribución de las coherencias interbanda de la de las poblaciones y coherencias intrabanda. Comenzamos con la contribución de la **coherencias interbanda**, es decir, el segundo término en las ecuaciones (4.54) y (4.55). Éstas serán lineales en A_0 , y podemos encontrar su expresión utilizando la forma funcional de $\rho_{\nu m \nu, cm' \nu'}^{\alpha(1)}$ dada por la ecuación (4.30), y las expresiones para los elementos de matriz en la RWA de la ecuación (4.19). Para luz con polarización circular izquierda se obtiene, para la componente en \hat{r} :

$$\begin{aligned}
 j_{r,\alpha}^{(+)(coh)}(\mathbf{r}, t) &= -4A_0 e^2 v_F^2 \cos[(l+1)\theta] \sum_{m,\nu,\nu'} \frac{N_{m+1,\nu} N_{m+l+1,\nu'}}{2\pi} J_{m+1}(q_{m+1,\nu} r) J_{m+l+1}(q_{m+l+1,\nu'} r) \\
 &\times I_{m+1,\nu}^{m+l+1,\nu'}(q, l) [e^{-i\omega t} Y_{(m+l+1)\nu', m\nu}(t) + e^{i\omega t} Y_{(m+l+1)\nu', m\nu}^*(t)].
 \end{aligned} \tag{4.56}$$

Para el caso de luz circularmente polarizada a derecha:

$$\begin{aligned}
 j_{r,\alpha}^{(-)(coh)}(\mathbf{r}, t) &= 4A_0 e^2 v_F^2 \cos[(l-1)\theta] \sum_{m,\nu,\nu'} \frac{N_{m+1,\nu} N_{m+l-1,\nu'}}{2\pi} J_{m+1}(q_{m+1,\nu} r) J_{m+l-1}(q_{m+l-1,\nu'} r) \\
 &\times I_{m,\nu}^{m+l,\nu'}(q, l) [e^{-i\omega t} Y_{(m+l-1)\nu', m\nu}(t) + e^{i\omega t} Y_{(m+l-1)\nu', m\nu}^*(t)].
 \end{aligned} \tag{4.57}$$

Podemos observar que la componente en \hat{r} de la contribución de coherencias a la corriente no se anula absolutamente para ningún valor de l , si bien cuando el momento angular total

de la luz es cero ($l = -\sigma$) desaparece la dependencia azimutal. Para la componente en $\hat{\theta}$ se tiene, si $\sigma = +1$:

$$\begin{aligned}
 j_{\theta,\alpha}^{(+)(coh)}(\mathbf{r}, t) &= 4A_0 e^2 v_F^2 \sin[(l+1)\theta] \sum_{m,\nu,\nu'} \frac{N_{m+1,\nu} N_{m+l+1,\nu'}}{2\pi} J_{m+1}(q_{m+1,\nu} r) J_{m+l+1}(q_{m+l+1,\nu'} r) \\
 &\times I_{m+1,\nu}^{m+l+1,\nu'}(q, l) [e^{-i\omega t} Y_{m'\nu',m\nu}(t) + e^{i\omega t} Y_{m'\nu',m\nu}^*(t)], \quad (4.58)
 \end{aligned}$$

y para $\sigma = -1$:

$$\begin{aligned}
 j_{\theta,\alpha}^{(-)(coh)}(\mathbf{r}, t) &= -4A_0 e^2 v_F^2 \sin[(l-1)\theta] \sum_{m,\nu,\nu'} \frac{N_{m+1,\nu} N_{m+l-1,\nu'}}{2\pi} J_{m+1}(q_{m+1,\nu} r) J_{m+l-1}(q_{m+l-1,\nu'} r) \\
 &\times I_{m,\nu}^{m+l,\nu'}(q, l) [e^{-i\omega t} Y_{m'\nu',m\nu}(t) + e^{i\omega t} Y_{m'\nu',m\nu}^*(t)]. \quad (4.59)
 \end{aligned}$$

En todos estos términos se observa una oscilación rápida a la frecuencia del haz, y una oscilación lenta relacionada con el *detuning*. La componente en $\hat{\theta}$ se anula absolutamente cuando $l = \mp 1$ para $\sigma = \pm 1$, algo que muestra que si el fotón no tiene momento angular neto ($l = -\sigma$), no transfiere momento angular y no va a generar una corriente que “rote” alrededor del eje del haz. Observemos, además, que la dependencia con α desapareció, pese a que las coherencias en sí mismas dependen del punto de Dirac, puesto que el término de coherencias de la corriente también es lineal en α .

Calculamos, ahora, la contribución de las **poblaciones y coherencias intrabanda**. El orden más bajo no trivial será cuadrático en A_0 , y no dependerá del punto de Dirac, pues tanto el término de coherencias intrabandas de la corriente como dichas corrientes en sí mismas son independientes de α . Para hacer este cálculo debemos recordar las expresiones para el producto de dos elementos de matriz dados por la ecuación (4.33), y notar que:

$$\rho_{\lambda m\nu, \lambda m'\nu'}^{(2)} \propto \delta_{m,m'} \quad \forall \lambda, \nu, \nu'.$$

Por esta razón, la componente en \hat{r} de la corriente será idénticamente nula a orden dos en A_0 , puesto que:

$$j_r^{(\sigma)(pop)}(\mathbf{r}, t) \propto \sin[(m' - m)\theta] \delta_{m',m} = 0, \quad (4.60)$$

y la componente en $\hat{\theta}$ no presentará dependencia azimutal, siendo:

$$J_{\theta}^{(\sigma)(pop)}(\mathbf{r}, t) = 2ev_F \sum_{m, n, \nu, \nu'} \frac{N_{m+1, \nu} N_{m, \nu'}}{2\pi} J_{m+1}(q_{m+1, \nu} r) J_m(q_{m, \nu'} r) \left(\rho_{vm\nu, vm\nu'}^{(2)}(t) - \rho_{cm\nu, cm\nu'}^{(2)}(t) \right). \quad (4.61)$$

Podemos aplicar un razonamiento similar al utilizado al final de la sección anterior, para afirmar que los términos más relevantes en la suma son aquellos cercanos a la resonancia, y que la evolución temporal es una oscilación lenta. El índice asociado al momento angular de la luz, l , sólo aparece en la contribución de poblaciones de la corriente mediante las coherencias intrabanda $\rho^{(2)}(t)$.

Para finalizar cabe mencionar que aún en el caso $l = 0$ (es decir, cuando la luz no lleva momento angular orbital y se trata simplemente de un haz con una dependencia radial tipo Bessel en lugar de Gaussiana) existe una transferencia de momento angular a los electrones, evidenciado por una corriente que rota alrededor del eje del haz. Esto puede verse como una transferencia del **momento angular de espín** de los fotones al **momento angular orbital** de los electrones. Esto se evidencia desde el cálculo mismo de los elementos de matriz para el Hamiltoniano, pues se encuentra que éstos son proporcionales a $\delta_{m', m \pm (l \pm 1)}$, lo que puede escribirse como $\delta_{m', m \pm (l \pm \sigma)}$, a diferencia de lo ocurrido en el caso de transiciones interbanda en semiconductores [3], donde los elementos de matriz resultan proporcionales a $\delta_{m', m \pm l}$. Este resultado sí es hallado cuando se estudian *transiciones intrabanda* en semiconductores. La razón de esta diferencia es que en un semiconductor regular las bandas de conducción y de valencia tienen distinta simetría [9], y el espín de la luz “se gasta” en que el electrón pase de una banda con una cierta simetría (es decir, con orbitales con un determinado momento angular total) a otra. En el caso del grafeno, en cambio, los orbitales tanto de la banda de conducción como de la banda de valencia son del tipo $2p_z$, y por esta razón el espín del fotón es absorbido como momento angular. Esta es una diferencia importante entre el grafeno y otros semiconductores, pues por esta razón las transiciones interbanda del grafeno presentan características similares a las transiciones intrabanda un semiconductor regular.

Bibliografía

- [1] F. Halzen and A. Martin, *Quarks and Leptons: An introductory course in modern particle physics* (Wiley, 1984)
- [2] M. O. Scully and M. S. Zubairy, *Quantum Optics* (Cambridge University Press, 1997) Sec. 5.2
- [3] G. F. Quinteiro and P. I. Tamborenea, Phys. Rev. B **79**, 155450 (2009)
- [4] G. F. Quinteiro and P. I. Tamborenea, EPL **85**, 47001 (2009)
- [5] K. Novoselov, A. Geim, S. Morozov, D. Jiang, M. Katsnelson, I. Grigorieva, S. Dubonos and A. Firsov, Nature **306**, 666 (2004)
- [6] John David Jackson, *Classical Electrodynamics*, (John Wileys and Sons, 1966)
- [7] E. G. Mele, P. Karl and D. Tomanek, Phys. Rev. B **61**, 7669-7677 (2000)
- [8] Haug and Koch, *Quantum theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*, Fourth Edition (World Scientific Publishing Co., 2004)
- [9] Jasprit Singh, *Electronics and Optoelectronics Properties of Semiconductor Structures* (Cambridge University Press, Cambridge, 2003)

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo hemos estudiado la interacción de grafeno con *twisted light*. Utilizamos el Hamiltoniano efectivo para longitudes de onda largas, que se encuentra mediante el modelo de *tight-binding* al desarrollarlo cerca de las esquinas de la primera zona de Brillouin, llamados puntos de Dirac. Este Hamiltoniano efectivo es un Hamiltoniano de Dirac no masivo para $2 + 1$ dimensiones y sus autoestados tienen forma de espinores de dos componentes. En el carácter espinorial de los autoestados se condensa la información de la red, que parecía haberse perdido en el Hamiltoniano efectivo, pues cada componente del espinor se asocia a una de las subredes del panal de abejas. Esta variable es llamada *pseudoespín*, y resulta ser un momento angular.

En este trabajo, dada la simetría de los haces de *twisted light*, hemos encontrado los autoestados del problema en coordenadas polares, para las bandas de conducción y de valencia. Si bien estas soluciones ya se conocían, hemos estudiado con mayor detalle algunas de sus propiedades, relevantes a la hora de estudiar la interacción con la luz. Hemos hallado que dichos estados no son autoestados del momento angular orbital ni del pseudoespín, sino del momento angular total formado por la suma de estas dos variables. Esto no se debe a una mala elección de la base de estados: el Hamiltoniano no conmuta con el operador de momento angular orbital ni con el operador de pseudoespín, en analogía a lo ocurrido con el Hamiltoniano de Dirac. Encontramos, además, que el autovalor del momento angular total coincide con el valor medio del momento angular orbital, pues el valor medio del pseudoespín es nulo, ya que los electrones se hallan homogéneamente distribuidos entre las dos subredes. Además del momento angular total, encontramos otro buen número cuántico: la helicidad.

Este operador tiene la ventaja de distinguir entre los estados de valencia, que tienen helicidad $-\hbar/2$, y de conducción, que tienen helicidad $+\hbar/2$.

Luego hemos escrito el Hamiltoniano de interacción con luz con momento angular orbital, utilizando la prescripción habitual que garantiza invariancia de gauge. Hemos encontrado que la matriz Hamiltoniana de interacción sólo posee elementos fuera de la diagonal. Recordando que las componentes de los espinores están asociadas a la variable *pseudoespín* y por ende a las subredes, pudimos interpretar este hecho de la siguiente manera: si tuviéramos originalmente un electrón localizado en una subred, la acción de la luz sobre éste sería hacerlo pasar a la otra subred (cambiaría la componente z de su pseudoespín). Este hecho es independiente del hecho de que la luz posea o no momento angular orbital (es decir, vale para $l = 0$). Sin embargo, como no es posible tener electrones localizados en una sola subred, la acción general de la luz sobre el grafeno es más compleja, y para entenderla calculamos los elementos de matriz para el Hamiltoniano de interacción, considerando estados de conducción y valencia asociados a alguno de los puntos de Dirac. Encontramos que los elementos de matriz dependen linealmente de α , variable con la que etiquetamos uno u otro punto de Dirac, y presentan deltas de Kronecker que hacen referencia a la transferencia de momento angular entre los fotones de la luz y los electrones del grafeno. Las deltas halladas son de la forma $\delta_{m', m \pm (l + \sigma)}$, es decir, tanto el momento angular de espín de la luz como el orbital se transfieren al momento angular orbital de los electrones. Esto ya se ha hallado para transiciones intrabanda en semiconductores, pero en el caso del grafeno es válido para las interacciones interbanda. La razón es que la simetría de las dos bandas en el grafeno es la misma (orbitales tipo $2p_z$), de manera que en ese sentido las transiciones interbanda en grafeno son como transiciones intrabanda en otros semiconductores.

Luego hemos estudiado numéricamente el comportamiento de las integrales involucradas en los elementos de matriz. Existe otro parámetro que etiqueta nuestros estados, ν , asociado al momento lineal. Encontramos que no existe una regla de selección exacta para esta variable, sino que existe una dispersión en los ν' finales posibles. Encontramos que esta dispersión tiene forma de campana Lorentziana, con un máximo en un $\nu_{max} \neq \nu$, y caracterizada por un ancho Δ . Estudiamos cómo varían estos parámetros al modificar ν , m y l . Encontramos que esta dispersión en ν está asociada a la utilización de un haz real (con ancho bien definido) y **no** a la utilización de luz con momento angular orbital.

Hemos realizado el planteo del problema en el formalismo de segunda cuantización, es-

cribiendo las ecuaciones de movimiento de Heisenberg para las poblaciones, polarizaciones interbanda e intrabanda, que hemos resuelto analíticamente en el régimen de baja excitación, de manera iterativa, utilizando los elementos de matriz hallados. Hemos encontrado que el orden más bajo no trivial para las coherencias interbanda es lineal en A_0 , mientras que las poblaciones y coherencias intrabanda son cuadráticas en A_0 . La importancia de estas magnitudes radica en que aparecen en las magnitudes físicas que nos interesa calcular para estudiar la dinámica de los electrones fotoexcitados.

Para estudiar la transferencia de momento angular, hemos considerado en primer lugar el operador momento angular total. Por ser diagonal en la base de autoestados utilizada, este operador tiene una expresión muy sencilla en segunda cuantización, y sólo involucra términos asociados a poblaciones. El operador momento angular orbital no es diagonal en la base utilizada y por lo tanto su expresión en segunda cuantización es más compleja. Sin embargo, al tomar valor medio en un estado inicial, encontramos que coincide con el momento angular orbital, como esperábamos del planteo en primera cuantización. Encontramos que estos operadores oscilan lentamente en el tiempo, y son cuadráticos en A_0 , por no poseer contribución de coherencias interbanda.

Hemos considerado, además, el término diamagnético del momento angular, necesario para conservar la invariancia de gauge. Los elementos de matriz para este operador son proporcionales a A_0 , de manera que siempre es un orden de magnitud menor que el término paramagnético del momento angular. Es decir, el término de poblaciones (o de coherencias interbanda) del momento angular diamagnético es de orden A_0^3 , y lo despreciamos frente al término paramagnético. Sin embargo, al ser nula la contribución de coherencias del término paramagnético, hemos calculado la del término diamagnético, encontrando que también podemos despreciarla.

Por último, hemos estudiado las corrientes inducidas, separándolas también en sus contribuciones de poblaciones o coherencias intrabanda, y de coherencias interbanda. Escribimos las componentes en \hat{r} y $\hat{\theta}$, pues respetan mejor la simetría del sistema, y ayudan a relacionar la corriente con la transferencia de momento angular. Las contribuciones de coherencias interbanda a la corriente poseen una oscilación rápida a la frecuencia del haz, y una oscilación lenta asociada con el *detuning*. La componente en $\hat{\theta}$ se anula absolutamente (para todo t) cuando $l = -\sigma$, es decir, cuando el momento angular total del fotón es cero. Entonces, si el fotón no tiene momento angular neto, no transfiere momento angular a los electrones, y no

genera una corriente que rote alrededor del eje del haz. En la contribución de poblaciones la componente en \hat{r} es nula para todo tiempo, y en la componente en $\hat{\theta}$ el parámetro l sólo aparece dentro de las coherencias $\rho^{(2)}(t)$.

Es decir, como resultado final de este trabajo hemos obtenido la evolución temporal de variables físicas relevantes al problema de la excitación de grafeno con luz con momento angular orbital, en la aproximación de baja fotoexcitación. Para lograrlo hemos estudiado con detalle las propiedades de los estados del grafeno, clarificando la manera en la que el potencial vector actúa sobre éstos. Si bien la mayoría de los resultados cualitativos obtenidos no son inherentes de la interacción con luz que posea momento angular orbital, fue esta característica de la luz la que nos impulsó a estudiar con más detalle el momento angular orbital de los estados del grafeno, y con él también el momento angular total, el pseudoespín y la helicidad. Algunas perspectivas para el futuro son el cálculo de otras magnitudes físicas relevantes, como por ejemplo la conductividad óptica o la opacidad.

Agradecimientos

Quiero agradecerle en primer lugar a mis papás, Marcelo y Patricia, por haberme dado todo lo que estuvo en sus manos siempre, haberme apoyado, incentivado a mejorar y aguantado en cada crisis que tuve a lo largo de la carrera (que no fueron pocas). Es gracias a ellos que estoy acá. También les agradezco a mis hermanos porque (casi siempre) bajaron el volúmen de la play cuando les dije que tenía que estudiar :) je, no, saben que los adoro y les agradezco por divertirme y hacerme compañía.

A Andrés, por ser mi amor, mi compañero, mi mejor amigo. Por estar conmigo todos los días y tenerme paciencia y confianza, por aguantar mis múltiples ratos de mal humor y siempre lograr hacerme reír.

A mis directores, Pablo y Guillermo, por la infinita paciencia que me tuvieron, y por haberme permitido trabajar con ellos. Les agradezco por todo lo que aprendí durante el desarrollo de esta tesis.

Quiero agradecer a mis amigos que, desde adentro o desde afuera de la carrera, me acompañaron durante estos años. A los que me explicaron las materias, a los que se colgaron conmigo de los árboles o compartieron cafés y porciones de torta. Me encantaría nombrarlos a todos, pero como no puedo, voy a mencionar algunos casos particulares. En primer lugar, quiero agradecer a los que me bancaron en mis momentos de mayor histeria de la carrera, es decir, a mis compañeros de labo: Antu, Esteban, Yago. A Tomi, que me dio una mano inifnita con la parte numérica de esta tesis, sin él y su mucha paciencia no tendría ni medio gráfico; decir que me ayudaste es poco, gracias Tomi! A Manu y Sole, porque pasan los años y nos vemos poco, pero cada vez que las veo siento que estamos en el Havanna de Av. de Mayo festejando que terminó el trimestre. Y a Turiax, porque si no fuera por él no sólo no habría aprobado ni la mitad de las materias, sino que probablemente no me habría animado a estudiar física.

Además, quiero agradecer a los docentes que tuve a lo largo de la carrera, que en general siempre le pusieron mucha onda y tuvieron muy buena predisposición, me bancaron consultando todos los días hasta las 10 de la noche, preguntando cosas por mail, etc.

Por último, quiero agradecerle a Mirta Bindstein, que me enseñó muchas cosas además de matemática, y que cuando era muy chiquita me enseñó que *no se puede pactar con las dificultades, o las vencemos o nos vencen*.