

Propiedades magnéticas de materiales 2D



Federico Nahuel Escudero

Departamento de Física

Universidad Nacional del Sur

Tesis presentada para obtener el grado de

Doctor en Física

2020

Prefacio

Esta tesis es presentada como parte de los requisitos para optar al grado Académico de Doctor en Física, de la Universidad Nacional del Sur, y no ha sido presentada previamente para la obtención de otro título en esta Universidad u otras. La misma contiene los resultados obtenidos en investigaciones llevadas a cabo en el Departamento de Física e IFISUR, durante el período comprendido entre Abril de 2016 y Agosto de 2020, bajo la dirección del Dra. Paula Verónica Jasen, Profesora Asociada del Dpto. de Física e Investigadora Independiente del CONICET, y bajo la codirección del Dr. Juan Sebastián Ardenghi, Profesor Adjunto del Dpto. de Física e Investigador Adjunto del CONICET.

Federico Nahuel Escudero



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR
Secretaría de Posgrado y Educación Continua

La presente tesis ha sido aprobada el/...../....., mereciendo la calificación de (.....).

Agradecimientos

A todos los profesores y ayudantes que tuve durante la carrera, sin cuyo conocimiento y motivación no hubiese llegado hasta aquí.

Al todo el grupo de investigación dirigido por el Dr. Alfredo Juan, quienes me recibieron con la más alta predisposición.

A mi directora, la Dra. Paula Jasen, por su experiencia y ayuda ante cualquier consulta.

A mi co-director, el Dr. Juan Sebastián Ardenghi, con quién principalmente desarrollé esta tesis. Por transmitirme su conocimiento y por su infinita predisposición ante todas mis inquietudes.

A mi familia, por su soporte a lo largo de toda la carrera.

Resumen

En esta tesis se han estudiado las propiedades magnéticas en materiales 2D tales como grafeno o siliceno. En primer lugar se analizaron las oscilaciones magnéticas (OM) que ocurren a bajas temperaturas en presencia de un fuerte campo magnético perpendicular. Para el estado fundamental se desarrolló un formalismo general que permite describir las propiedades de las OM, tales como su frecuencia y amplitud, en función de los parámetros externos y las propiedades de los materiales 2D. Se demostró que las características únicas de los sistemas bidimensionales, tales como el comportamiento relativista de los electrones a bajas energías, se ven directamente reflejadas en el perfil de las OM. Esto permite mapear sus propiedades mediante un análisis detallado de las oscilaciones en la magnetización. Los efectos de decaimiento, tales como temperatura finita o impurezas en el sistema, también son tenidos en cuenta. Para ello se desarrolló un nuevo enfoque, alternativo a la tradicional fórmula de Lifshitz-Kosevich, el cual permite describir en detalle cómo el incremento de los efectos de decaimiento reduce progresivamente los detalles finos en las OM, y por lo tanto la capacidad de extraer información a partir de éstas. Por otra parte, se estudió la formación de momentos magnéticos locales en impurezas metálicas adsorbidas en la red de grafeno. Se analizó cómo la aparición de magnetismo en la impureza depende del sitio de adsorción en la red (*top* o *hollow*). A su vez, se estudió la posibilidad de manipular los momentos magnéticos al variar el nivel de Fermi mediante un *gate voltage*, lo cual puede ser útil para aplicaciones en la espintrónica.

Abstract

In this thesis we have studied the magnetic properties in 2D materials such as graphene or silicene. First we analyzed the magnetic oscillations (MO) that occur at low temperatures in the presence of a strong perpendicular magnetic field. For the ground state we developed a general formalism which allows to describe the properties of the MO, such as its frequency and amplitude, as a function of the external parameters and the properties of the 2D materials. We showed that the unique characteristics of the two-dimensional systems, such as the relativistic behavior of the electrons at low energies, are directly reflected in the MO profile. This allows to map its properties through a detailed analysis of the oscillations in the magnetization. The damping effects, such as finite temperature or impurities in the system, are also taken into account. For that we developed a new approach, alternative to the traditional Lifshitz-Kosevich formula, which allows to describe in detail how the increase in the damping effects progressively reduce the fine details in the MO, and therefore the capacity to extract information from them. On the other hand, we have studied the formation of local magnetic states in metallic impurities adsorbed in the graphene lattice. We analyzed how the appearance of magnetism in the impurity depends on the site of adsorption in the lattice (*top* or *hollow*). Moreover, we studied the possibility of manipulating the magnetic moments by varying the Fermi level through a *gate voltage*, which can be useful for applications in spintronic.

Nomenclatura

Abreviaciones

OM	Oscilaciones Magnéticas
DE	Desdoblamiento de Espín
MV	Mezclado de Valle
TB	<i>Tight Binding</i> (Enlace Fuerte)
NL	Niveles de Landau
DOS	Densidad de estados (<i>Density Of States</i>)
SO	<i>Sawtooth oscillations</i> (Oscilaciones discontinuas, tipo <i>diente de sierra</i>)
IEO	Interacción espín-órbita

Símbolos

A	Amplitud de oscilación
M	Magnetización
Ω	Gran potencial
H	Hamiltoniano
B	Campo magnético
E_z	Campo eléctrico perpendicular
\mathcal{A}	Área del sistema bidimensional
N	Número de partículas
F	Energía libre de Helmholtz
v_F	Velocidad de Fermi
μ	Potencial químico (energía de Fermi)
T	Temperatura
k_B	Constante de Boltzman
λ_{SO}	Interacción espín-órbita
μ_B	Magnetón de Bohr
ρ	Densidad de estados
Γ	Parámetro de ensanchamiento en la DOS

Índice

Índice	vi
1. Introducción	1
1.1. Objetivos de la tesis	1
1.2. La física de los materiales 2D	2
1.2.1. Grafeno	3
1.2.2. Materiales 2D con <i>buckling</i>	4
1.3. Oscilaciones magnéticas	5
1.3.1. Niveles de Landau	5
1.3.2. Potenciales termodinámicos y magnetización	6
1.3.3. Efecto de la temperatura e impurezas	9
1.3.4. Limitaciones de la fórmula LK	13
1.4. Momentos magnéticos	14
1.4.1. Momentos magnéticos en metales	15
1.4.2. Momentos magnéticos en materiales 2D	17
2. Métodos teóricos	20
2.1. Magnetización	20
2.1.1. Gran potencial	21
2.1.2. Estado fundamental	23
2.1.3. Expansión en series de Fourier	26
2.1.4. Fórmula de Lifshitz-Kosevich	28
2.2. Segunda cuantización	29
2.2.1. Representación de ocupación de números	30
2.2.2. Modelo de <i>Tight Binding</i>	33
2.2.3. Modelo de Hubbard	35
2.3. Modelo de Anderson	36
2.3.1. Función de Green y método autoconsistente	37

3. Propiedades electrónicas de los materiales 2D	39
3.1. Grafeno	39
3.1.1. Propiedades básicas del carbono	40
3.1.2. Estructura geométrica	41
3.1.3. Modelo de <i>Tight Binding</i>	42
3.1.4. Aproximación a bajas energías: ecuación de Dirac	44
3.1.5. Densidad de estados	45
3.1.6. Niveles de Landau	46
3.2. Materiales 2D con <i>buckling</i>	49
3.2.1. Estructura geométrica	50
3.2.2. Modelo de <i>Tight Binding</i>	50
3.2.3. Aproximación a bajas energía	52
3.2.4. Niveles de Landau	53
4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental	55
4.1. Formulación general	55
4.1.1. Niveles de Landau	56
4.1.2. Oscilaciones magnéticas para N constante	57
4.1.2.1. Energía y magnetización	58
4.1.2.2. Oscilaciones magnéticas	59
4.1.3. Oscilaciones magnéticas para μ constante	61
4.1.3.1. Gran potencial y magnetización	61
4.1.3.2. Oscilaciones magnéticas	62
4.2. Grafeno	64
4.2.1. Oscilaciones magnéticas para N constante	64
4.2.1.1. Efecto del desdoblamiento de espín	68
4.2.1.2. Amplitud de las oscilaciones	69
4.2.2. Oscilaciones magnéticas para μ constante	71
4.2.2.1. Efecto del desdoblamiento de espín	74
4.2.3. Comparación entre los casos N o μ constante	75
4.2.3.1. Frecuencia y fase	76
4.2.3.2. Amplitud	76
4.3. Materiales 2D con <i>buckling</i>	78
4.3.1. Oscilaciones magnéticas para N constante	78
4.3.1.1. Mezcla de NL, valle y espín	79
4.3.1.2. Clasificación de los picos de OM	81
4.3.1.3. Límite $elE_z \ll 1$ eV	82
4.3.1.4. Caso general para E_z	87

4.3.2.	Oscilaciones magnéticas para μ constante	89
4.3.2.1.	Frecuencias de oscilación	92
4.3.2.2.	Batido de frecuencias	93
4.3.3.	Comparación entre los casos N o μ constante	96
4.3.3.1.	Fenómeno de batido	96
5.	Oscilaciones magnéticas con decaimiento	99
5.1.	Formulación general	99
5.1.1.	Gran potencial y magnetización	100
5.1.2.	Efectos de decaimiento en función de los NL	102
5.1.3.	Efectos de decaimiento como factores de reducción	104
5.1.4.	Comparación entre ambas descripciones	106
5.1.5.	Efecto de la temperatura sobre cada oscilación	110
5.1.6.	Efecto de las impurezas	112
5.1.7.	Oscilaciones del potencial químico	113
5.2.	Grafeno	115
5.2.1.	Efecto de la temperatura	116
5.2.2.	Observación del desdoblamiento de espín	117
5.2.3.	Desplazamiento de los extremos	121
5.2.4.	Envolvente	124
5.2.5.	Efecto de la temperatura para N constante	125
5.3.	Materiales 2D con <i>buckling</i>	129
5.3.1.	Efecto de la temperatura	129
5.3.2.	Observación del desdoblamiento de espín	132
5.3.3.	Observación del mezclado de valle	133
5.3.4.	Aproximación de las OM para <i>altas temperaturas</i>	136
5.3.5.	Envolvente	138
5.3.6.	Efecto de la temperatura para N constante	139
6.	Momentos magnéticos locales	143
6.1.	Modelo de Anderson en grafeno	143
6.1.1.	Densidad de estados en la impureza	147
6.1.2.	Formación de momentos magnéticos locales	150
6.1.3.	Transición magnética	153
7.	Conclusiones	159

Apéndices para el Capítulo 5	163
A. Aproximación de las OM para $\beta\mu, \mu/\Gamma \gg 1$	163
B. Parte oscilatoria de los efectos de decaimiento	165
C. Equivalencia entre las ec. (5.12) y (5.13)	167
D. Efectos de decaimiento como factores de reducción	169
E. Ejemplos de efectos de decaimiento	170
E.1. El caso prístino	171
E.2. Impurezas a temperatura nula	171
Bibliografía	173
Lista de Publicaciones	189

Capítulo 1

Introducción

En esta tesis doctoral se estudian las propiedades magnéticas de los materiales 2D con una estructura de red hexagonal, tales como grafeno o siliceno. En particular, se analizan fenómenos como las oscilaciones magnéticas (efecto de Haas-van Alphen) y la formación de momentos magnéticos locales. Se tienen en cuenta los efectos de la temperatura y las impurezas, así como también la dependencia de los niveles de energía con los campos magnéticos y eléctricos, considerando el acoplamiento espín-órbita y el efecto Zeeman. Las propiedades magnéticas se modelan aplicando diferentes herramientas analíticas y numéricas, con el objetivo de generar bases sólidas para la interpretación de los resultados experimentales. Se propone explotar las capacidades del cálculo analítico para predecir tendencias y guiar la selección de las perturbaciones externas al sistema, ya sea temperatura, defectos, campos externos u otras interacciones, con el fin de aplicar los resultados obtenidos a procesos de interés tecnológico.

1.1. Objetivos de la tesis

En la presente tesis doctoral, los procesos de interés incluyen el análisis de las propiedades magnéticas en materiales 2D, teniendo en cuenta los efectos de la temperatura, impurezas, campos magnéticos y eléctricos externos, acoplamiento espín-órbita y desdoblamiento de espín. En particular se estudiará la influencia de estos efectos en las oscilaciones magnéticas (OM), con el fin de comprender cómo varían sus amplitudes y frecuencias, y aplicar los resultados a la caracterización de materiales y posibles desarrollos en espintrónica. Además, se estudiará la posible formación de momentos magnéticos locales mediante la adsorción de un metal de transición en un sitio de la red cristalina, teniendo en cuenta la aproximación de campo medio con el parámetro de Hubbard.

Los sistemas bidimensionales se modelarán con la teoría de *Tight Binding* (TB) y considerando la aproximación a bajas energías, que es equivalente a considerar energías cercanas

1. Introducción

al nivel de Fermi. De este modo se obtiene un Hamiltoniano efectivo semejante a la ecuación de Dirac, donde la relación de dispersión es relativista. La aplicación de un campo magnético, perpendicular al plano del sistema bidimensional, dará lugar a los niveles de Landau, que en función de la geometría de la celda unidad, dependerán de manera no trivial con el índice n . Estos niveles originan oscilaciones en la magnetización, cuyas frecuencias y amplitud dependerán exclusivamente de las propiedades del material y de los demás parámetros externos.

Los objetivos particulares de esta tesis son:

- Desarrollar un modelo teórico de las oscilaciones magnéticas en los materiales 2D con perturbaciones externas, como campos eléctricos, impurezas, temperatura, acoplamiento espín-órbita o efecto Zeeman.
- Analizar las propiedades de las oscilaciones magnéticas en función de los parámetros del Hamiltoniano del sistema bidimensional. Estudiar cómo la temperatura y las impurezas reducen las oscilaciones magnéticas y afectan su observación.
- Desarrollar el proceso de ingeniería inverso, en el cual a partir de las oscilaciones magnéticas experimentales se puede inferir información de los niveles de energía del sistema en cuestión.
- Estudiar la formación de momentos magnéticos locales en sistemas bidimensionales por medio de la adsorción de impurezas magnéticas, teniendo en cuenta la correlación de intercambio por medio del modelo de Anderson con el parámetro de Hubbard.

1.2. La física de los materiales 2D

Desde que se pudo aislar experimentalmente al grafeno en 2004^[1-5], ha habido una revolución en la física de la materia condensada en cuanto al estudio de estos sistemas^[4-6]. Debido a que son estrictamente materiales bidimensionales, con un ancho no más grande que el espesor de un átomo, estos materiales 2D poseen características únicas^[7,8], no comunes en el típico metal 3D presente en los componentes tecnológicos. Dichas propiedades no solo resultan prometedoras desde el punto de vista de la aplicabilidad tecnológica^[9-12], sino también desde el punto de vista de la física fundamental^[13-15]. En efecto, debido a su particular estructura, el comportamiento de los materiales 2D presenta semejanza al comportamiento de los electrones relativistas en la física de altas energías^[16]. Así, fenómenos relativistas, presentes solo a altas energías^[17], pueden estudiarse en sistemas más accesibles experimentalmente^[18,19]. En dicho sentido puede decirse que el estudio de los materiales 2D es relevante tanto desde el punto de vista tecnológico como teórico.

1. Introducción

1.2.1. Grafeno

El grafeno fue aislado experimentalmente en 2004 por los científicos rusos Andre Geim y Konstantin Novoselov^[1], logro por el cual posteriormente recibieron el premio Nobel de física en 2010. El hecho fue importante puesto que se consideraba que el grafeno libre (aislado) no era estable^[20,21]. Desde entonces las propiedades del grafeno han sido bien documentadas: es uno de los materiales más fuertes^[22,23] (unas 200 veces más fuerte que el acero) y posee una gran conductividad térmica^[24–26] y eléctrica^[25,27–29]. Estas propiedades están relacionadas con su estructura hexagonal en dos dimensiones.

Cada sitio de la red está ocupado por un átomo de carbono. Sin impurezas o defectos, las bandas de conducción y de valencia se tocan en el nivel de Fermi^[16], con la banda de valencia completa y la banda de conducción vacía en su estado fundamental^[30]. A su vez, en grafeno prístino (i.e. sin impurezas), la densidad de estados es cero en el nivel de Fermi, haciéndolo un semiconductor con un *bandgap* igual a cero, es decir, un semimetal^[31]. Esta característica ya de por sí lo distingue del típico metal, produciendo efectos en grafeno que no se observan en otros materiales. Uno de ellos es, por ejemplo, el efecto Hall cuántico anómalo^[32], debido precisamente a la densidad de carga nula en el nivel de Fermi^[33]. Desde el punto de vista de la física teórica, quizás la característica más atrayente del grafeno es que a bajas energías, cerca del nivel de Fermi, los electrones se comportan como electrones relativistas sin masa^[34]. Es decir, su relación de dispersión es del tipo $\varepsilon_k \sim |\mathbf{k}|$. Esto implica que fenómenos relativistas se pueden observar en grafeno, lo cual es una ventaja desde el punto de vista experimental^[35].

Cabe destacar que el grafeno es uno de los varios alótropos del carbono. Otros alótropos son el grafito^[36], los nanotubos de carbono^[37] y el fullereno^[38,39]. El grafito es un material 3D, conocido por su uso en los lápices, y es la base de los demás materiales con menor dimensión. Así, el grafeno no es más que una simple capa de grafito, o dicho de otra manera, el grafito son muchas capas de grafeno superpuestas. Este principio da lugar a uno de los métodos más rudimentarios para obtener grafeno: el método de la *cinta scotch*, en el cual se logra una capa de grafeno al ir despegando las capas de grafito mediante la cinta^[3]. Por su parte, los nanotubos de carbono son grafeno enrollado en forma cilíndrica. La geometría curva, que físicamente es unidimensional, da lugar a propiedades únicas en los nanotubos^[40,41]. El fullereno, en tanto, es una molécula compuesta por átomos de carbono, que en general adoptan una forma esférica^[42]. Dicha configuración puede obtenerse introduciendo defectos tipo pentágonos en grafeno (los cuales generan una curvatura positiva), de manera que fullereno puede pensarse como grafeno enrollado^[43].

A pesar de que el grafeno se logró experimentalmente solo hace poco más de una década, su proposición teórica data de mucho antes. En 1946 el físico P. R. Wallace estudió por primera vez las propiedades electrónicas de una simple hoja de grafito^[34] (es decir, grafeno).

1. Introducción

Obtuvo la estructura de bandas, mostrando que a bajas energías se obtiene una relación de dispersión de tipo relativista. Más aún, demostró el inusual comportamiento semimetálico en grafeno, con una densidad de estados nula en el nivel de Fermi. Por entonces, estos resultados, aunque interesantes en principio, no eran muy relevantes puesto que no se consideraba que pudiera existir por sí sola una estructura puramente bidimensional^[44]. Más bien, las ideas de Wallace estaban enfocadas en entender mejor el comportamiento del grafito, un material que sería importante para los reactores nucleares en el mundo de posguerra^[45].

1.2.2. Materiales 2D con *buckling*

Desde la obtención del grafeno, en los últimos años ha habido una proliferación de materiales 2D similares^[7,8,46,47]. Entre estos se encuentran el siliceno^[48-51], el germaneno^[52,53], y el estaneno^[54,55], cada uno compuesto, como su nombre indica, por átomos de silicio, germanio y estaño en cada sitio de la red. Estos materiales comparten la estructura hexagonal del grafeno, lo cual implica que a bajas energías los electrones también se comportan como relativistas, con un Hamiltoniano efectivo semejante a la ecuación de Dirac. Sin embargo, estos materiales 2D se distinguen del grafeno en dos características importantes: una de ellas es el acoplamiento de espín-órbita, que es prácticamente despreciable en grafeno^[16] ($\sim 10^{-3}$ meV), pero relativamente grande en los demás materiales^[56] (por ejemplo, 0,1 eV en estaneno), haciéndolos aislantes topológicos^[55,57,58]. El acoplamiento espín-órbita hace posible, entre otras cosas, observar el efecto Hall cuántico de espín^[59-61]. La otra propiedad es que mientras el grafeno es plano^[62], en los demás materiales la estructura es corrugada^[8] (posee un *buckling*) en la dirección perpendicular, con una separación entre las subredes. Esto implica que, introduciendo un campo eléctrico en la dirección perpendicular al material, se puede crear una diferencia de potencial entre las dos subredes, originando un *bandgap*^[63-65]. Además, cada material posee una velocidad de Fermi diferente^[50], debido a que la integral de solapamiento entre orbitales depende del sistema.

Debido a la mayor libertad para modificar las propiedades electrónicas, los materiales 2D con *buckling* son candidatos ideales para la tecnología del futuro, incluso quizás en mayor medida que el grafeno. Sin embargo, existe un contrapunto: hasta el momento no han sido aislados experimentalmente^[50]. Es decir, su obtención experimental se logra, por ahora, solo sobre un sustrato^[66-68]. En consecuencia, las propiedades electrónicas y magnéticas de estos materiales 2D son, por naturaleza, de tipo teórica. De todas maneras, como también sucede en grafeno, dichas propiedades no se esperan que difieran demasiado debido al sustrato^[69,70], de manera que es razonable extender los resultados de los materiales 2D aislados, aún en el caso experimental que se obtengan sobre un sustrato. Más aún, es muy probable que en el futuro próximo se logre aislar experimentalmente al siliceno, germaneno o estaneno, de manera que un estudio de las propiedades teóricas de estos materiales aislados podría bien

1. Introducción

ser relevante dentro de los próximos años. A su vez, más allá de las ventajas que presentan el siliceno y los demás materiales, debido al *buckling* de la red y la no despreciable interacción espín-órbita (IEO), vale decir que también poseen la ventaja de su natural integración dentro de la tecnología actual, basada fuertemente en Si y Ge.

1.3. Oscilaciones magnéticas

La discretización de la energía, en la mecánica cuántica, tiene consecuencias fundamentales en el comportamiento de las propiedades de los materiales. Así fue, por ejemplo, que Max Planck originalmente explicó la radiación de un cuerpo negro, considerando que la energía en la cavidad no era continua, sino que venía discretizada en paquetes de energía^[71]. Uno de los ejemplos en los cuales esta discretización de la energía es aparente son los niveles de Landau^[72], que surgen al aplicar un campo magnético. La discretización de dichos niveles genera que los potenciales termodinámicos oscilen al cambiar el campo magnético. Así, por ejemplo, la magnetización oscila al variar el campo magnético, lo cual se conoce como efecto de Haas-van Alphen^[73]. Este efecto, originalmente considerado una simple curiosidad, terminó teniendo importantes aplicaciones a la hora de dilucidar la estructura electrónica de los metales. El fundamento reside en que la frecuencia de estas oscilaciones está relacionada con cómo es la superficie de Fermi del sistema, la cual incide en cómo son sus propiedades electrónicas^[74].

1.3.1. Niveles de Landau

Para entender el fenómeno de las oscilaciones magnéticas (OM), es necesario entender qué son los niveles de Landau (NL). A fines prácticos, el origen de los NL pueden explicarse considerando la antigua regla de cuantización que surgió en los orígenes de la mecánica cuántica. Esto está dado por la regla de Bohr-Sommerfeld para un movimiento periódico^[75,76]

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = (n + \gamma) 2\pi\hbar, \quad (1.1)$$

donde \mathbf{p} y \mathbf{r} son las variables conjugadas momento y posición, n es un entero y la integración se realiza sobre un ciclo completo de movimiento circular del electrón (por encontrarse en un campo magnético^[77]), luego de lo cual se adquiere una fase γ . Considerando el efecto del campo magnético con la substitución $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - e\mathbf{A}$, donde \mathbf{A} es el vector potencial^[78], de la regla (1.1) queda claro que el movimiento del electrón está cuantizado en órbitas discretas, puesto que n es un entero. Esto implica, a su vez, niveles de energía discretos ε_n : los niveles de Landau^[72]. La dependencia de ε_n con el índice n y el campo magnético (u otras variables del sistema, tales como el espín o distintos campos externos), depende de cómo es el sistema

1. Introducción

en el que el electrón se mueve. Para un gas clásico de electrones 2D (2DEG), con una relación de dispersión del tipo parabólica ($\varepsilon_{\mathbf{p}} \sim \mathbf{p}^2$), los NL son^[76] $\varepsilon_n = aB(n + 1/2)$, donde B es la magnitud del campo en la dirección perpendicular al sistema 2D y a es una constante que depende del material. En cambio, en un gas 2D con una relación de dispersión relativista ($\varepsilon_p \sim |\mathbf{p}|$), se obtienen los NL relativistas^[79,80] $\varepsilon_n = a\sqrt{Bn}$. Como veremos más adelante, esto es lo que sucede a bajas energías en los materiales 2D como el grafeno.

La cuantización de los niveles de energía, debido a la aplicación de un campo magnético, es el origen de las OM^[81]. Existe, sin embargo, otra variable fundamental que es la degeneración de los NL. Dicha degeneración se debe a que, técnicamente, el movimiento circular se cuantiza en una única dirección en el espacio de momento, de manera que la otra dirección queda libre. Sin embargo, la libertad de la dirección r_i no cuantizada aparece como una fase $e^{ik_i r_i}$ en la función de onda ψ , lo cual no cambia los autovalores del sistema. Los valores del momento k_i están sujetos a las dimensiones del sistema por $k_i = 2\pi m/L_i$, donde m es un entero y L_i es la longitud en la dirección $i = \{x, y\}$. Ahora bien, los valores de m están restringidos a que las órbitas de los electrones deben estar contenidas dentro de la dimensión de L_i . De esta manera se demuestra que $0 \leq m < \mathcal{A}B/\phi$, donde \mathcal{A} es el área del sistema 2D y $\phi = h/e$ es el flujo magnético unidad^[82]. Este resultado nos dice que cada NL ε_n tiene una degeneración $D = \mathcal{A}B/\phi$. Vale destacar que dicha degeneración es independiente de la naturaleza de los NL, sean del tipo clásico o relativistas. En general, para sistemas con dimensiones macroscópicas, y campos relativamente altos donde se puedan observar las OM, se tiene $D \gg 1$, por lo que cada NL es altamente degenerado. La degeneración D juega un papel importante en cómo se llenan los NL, lo cual está determinado por la relación N/D , donde N es la cantidad de electrones.

1.3.2. Potenciales termodinámicos y magnetización

Considerando los niveles de Landau en presencia de un campo magnético perpendicular, en sistemas bidimensionales se demuestra que en el estado fundamental el gran potencial Ω tiene una parte oscilatoria del tipo^[83]

$$\Omega_{osc} \sim \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi^2 p^2} \cos(2\pi p X), \quad (1.2)$$

donde X es una variable que depende del campo magnético y nos dice cuándo los NL cruzan el nivel de Fermi μ . De esta manera, para NL con una dependencia del tipo $\varepsilon_n \sim (Bn)^p$ (donde $p > 0$) se tiene $X \propto B^{-1}$. Esto da una dependencia periódica de Ω_{osc} con $1/B$, lo cual se mantiene en la magnetizaciónⁱ. De hecho, como veremos, este tipo de dependencia

ⁱLa dependencia $1/B$ no es general para cualquier tipo de NL. Por ejemplo, en doble-capa de grafeno los NL son^[84] $\varepsilon_n = aB\sqrt{n(n+1)}$, lo cual implica que Ω no es técnicamente periódica en $1/B$.

1. Introducción

se mantiene en los materiales 2D como grafeno. La constante de proporcionalidad en la ec. (1.2) depende de cómo es son los NL, y tiene incidencia en la amplitud de las oscilaciones magnéticas.

El calculo explícito de Ω , para el caso de NL en un metal 3D o un gas de electrones 2D, ha sido tratado en diferentes trabajos. En [83] se describen las OM en metales, donde se calcula una expresión para Ω en el caso de un slab 2D. En [85] se estudia un gas de electrones clásico 2D, con NL del tipo $\varepsilon_n = aB(n + 1/2)$, donde a μ constante se obtiene

$$\Omega_{osc} = \frac{DaB}{2} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi^2 p^2} \cos \left[2\pi p \left(\frac{\mu}{aB} + \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (1.3)$$

Desde el surgimiento de los materiales 2D, el gran potencial para los fermiones de Dirac, con NL del tipo relativistas, también ha sido calculado, aunque usualmente considerando casos especiales. Por ejemplo, ignorando el desdoblamiento de espín (DE) de los NL $\varepsilon_n = a\sqrt{Bn}$, en el límite de bajos campos, Sharapov *et al.* obtienen^[86]

$$\Omega_{osc} = \frac{Da^2B}{2\mu} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi^2 p^2} \cos \left(2\pi p \frac{\mu^2}{a^2B} \right). \quad (1.4)$$

Notar la diferencia entre el caso clásico [ec. (1.3)] y el caso relativista [ec. (1.4)]: en el último existe una dependencia con μ^2 , lo cual a su vez implica que la amplitud de las oscilaciones en Ω_{osc} depende de μ . Esta dependencia con μ^2 en el caso relativista conlleva, a su vez, que el decaimiento de las oscilaciones dependa del potencial químico, lo cual no sucede en el caso clásico.

De la parte oscilatoria de Ω , ec. (1.2), se obtiene que las oscilaciones magnéticas en el estado fundamental tienen la forma^[83]

$$M_{osc} \sim \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi p} \text{sen}(2\pi pX) + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi^2 p^2} \cos(2\pi pX), \quad (1.5)$$

donde la proporcionalidad nos dice cómo es la amplitud de las OM, lo cual depende del sistema particular. El primer término en M_{osc} es una oscilación tipo diente de sierra (*sawtooth oscillation*, SO), lo cual da lugar a una oscilación discontinua^[87]. Así, mientras que Ω_{osc} oscila de manera continua, como debe ser, la magnetización oscila de manera discontinua en sistemas 2D. En cambio, el segundo término en M_{osc} tiene el mismo tipo de dependencia ($\sim \cos(2\pi pX)/\pi^2 p^2$) que Ω_{osc} , y en general da lugar un cambio de curvatura en las SO^[83].

Estas expresiones para las OM han sido calculadas en un gas de electrones clásico, y extendidas a grafeno y otros materiales 2D, en casos especiales. En grafeno, Sharapov *et al.* obtienen, para μ constante e ignorando el DE, la expresión de las OM en el estado

1. Introducción

fundamental (a primer orden)^[86]

$$M_{osc} = -\frac{2\mu e}{h} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi p} \text{sen} \left(2\pi p \frac{\mu^2}{a^2 B} \right), \quad (1.6)$$

que no es más que la derivada respecto de B de la ec. (1.4) (quedándose solo con la serie seno dominante). Notar que la amplitud de las OM depende de μ pero no depende del campo magnético, como sucede en el caso clásico 3D^[83]. Para el caso de materiales 2D con *buckling*, considerando un campo eléctrico perpendicular E_z e ignorando el efecto Zeeman, Tabert *et al.* obtienen^[88]

$$M_{osc} = -\frac{e E_1^2}{h \mu} \sum_{\xi, \sigma = \pm 1} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{(\pi k)^2} \cos \left[\frac{\pi k (\mu^2 - \Delta_{\xi\sigma}^2)}{E_1^2} \right] - \frac{e}{h} \sum_{\xi, \sigma = \pm 1} \frac{\mu^2 - \Delta_{\xi\sigma}^2}{2\mu} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\pi k} \text{sen} \left[\frac{\pi k (\mu^2 - \Delta_{\xi\sigma}^2)}{E_1^2} \right], \quad (1.7)$$

donde $E_1 = v_F \sqrt{\hbar e B}$ y $\Delta_{\xi\sigma} = (\Delta_z - \xi\sigma \Delta_{SO})$, siendo Δ_z es la diferencia de potencial entre las subredes debida a la aplicación del campo E_z , Δ_{SO} la magnitud de la interacción espín-órbita, y $\xi, \sigma = \pm 1$ son los índices de valle y espín. Vemos entonces cómo las OM se vuelven más complicadas en los materiales 2D.

Las expresiones anteriores son válidas para el caso que el potencial químico μ es constante, lo cual necesariamente implica que la cantidad de electrones N varía al cambiar el campo magnético. De todos modos, para N constante se obtiene una dependencia similar en sistemas 2D. En efecto, en el estado fundamental se demuestra que la energía interna U oscila como^[83]

$$U_{osc} \sim \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi^2 p^2} \cos(2\pi p X). \quad (1.8)$$

Sin embargo, la dependencia de X con el campo, como también la amplitud de las oscilaciones, es en general diferente respecto del caso μ constante. Esto se debe a que el origen de las oscilaciones no es el mismo. Si μ es constante las oscilaciones ocurren cuando los niveles de energía cruzan el potencial químico ($\varepsilon_n = \mu$), mientras que si N es constante las oscilaciones ocurren cuando el último NL se llena (o desocupa) y entonces se empieza a llenar el siguiente (o anterior) NL. Así, mientras que para μ constante la frecuencia de las oscilaciones depende de los niveles de energía, para N constante la frecuencia de las oscilaciones depende más bien de la relación N/D , la cual indica cuándo se llenan los NL. Por lo tanto en general se puede decir que en la ec. (1.8) se tiene $X = N/\lambda D$, donde λ es un parámetro que depende de cualquier degeneración extra que puedan tener los niveles de energía.

1. Introducción

El caso de N constante implica que el potencial químico oscila con el campo magnético^[89,90]. En metales 3D, donde originalmente se desarrolló la teoría de las oscilaciones magnéticas, las oscilaciones de μ se reducen considerablemente al integrar los resultados anteriores sobre todas las posibles direcciones^[83]. Sin embargo, esto no sucede en un material o sistema 2D puro, donde de hecho las oscilaciones de μ pueden ser prominentes en el caso de que no haya un decaimiento apreciable en el sistema^[90], debido a temperatura finita o impurezas. Por lo tanto, es importante discernir entre los dos casos de μ constante o N constante en los materiales 2D. La aplicabilidad de cada situación depende del sistema en cuestión, en particular de cómo es la configuración experimental. Es decir, si al variar el campo magnético se mantiene μ constante (por ejemplo al aplicar un *gate voltage* que mantiene el nivel de Fermi^[31]), o en cambio el sistema está aislado y se mantiene solo la densidad electrónica constante. De hecho podría ser que, por razones de cómo es el experimento, uno no tenga certeza sobre si μ o N se mantiene constante. En consecuencia resulta importante entender teóricamente qué se esperaría en cada situación, si se quiere interpretar correctamente los resultados experimentales.

A pesar de que en años recientes se han estudiado diferentes propiedades de las OM en los materiales 2D^[91–96], los análisis se han realizado únicamente en situaciones especiales, por ejemplo solo para el caso de μ constante. El desdoblamiento de espín en los niveles de energía (debido al efecto Zeeman) es usualmente despreciado^[86,88], alegando la alta energía de ciclotrón de los NL en los materiales 2D, que implica que la diferencia de energía entre los NL es mucho mayor que la energía de Zeeman^[16,82]. Sin embargo, no existe un estudio minucioso que de cuentas de esta justificación, en particular en el caso de las OM en el estado fundamental (o a bajas temperaturas e impurezas). En efecto, podría decirse que la discontinuidad de las OM en el estado fundamental magnifica el efecto de que los niveles de energía sean discretos. Así, aunque la energía de Zeeman sea relativamente pequeña, puede resultar aún así apreciable en el ámbito de las OM. Más aún, no hay un estudio sobre cómo el efecto Zeeman, y/o los efectos del valle, se ven en las OM de los materiales 2D, dependiendo de sí el sistema corresponde a N constante o μ constante.

1.3.3. Efecto de la temperatura e impurezas

Los efectos de decaimiento, debido a la temperatura o impurezas, tienden a disminuir la amplitud de las OM, hasta eventualmente reducirlas completamente^[83]. Es por esto que, además de la necesidad de campos magnéticos grandes, en la práctica la observación de las OM solo es posible a bajas temperaturas (del orden de los Kelvin, digamos $T < 50$ K), en sistemas relativamente puros (impurezas bajas)^[73,97–100]. Mientras menor sea la temperatura y la impureza del material, mejor definidas estarán las OM.

1. Introducción

Desde el desarrollo teórico del formalismo de las oscilaciones cuánticas^[81], los efectos de decaimiento han sido, en general, tenidos en cuenta mediante factores de reducción en la amplitud de las oscilaciones. Esto da lugar a la conocida fórmula de Lifshitz-Kosevic (LK), la cual incorpora los efectos de la temperatura, impurezas y/o otros efectos de decaimiento, por medio de factores de reducción en la expansión armónica de las OM^[101]. Teniendo en cuenta las OM en el estado fundamental, ec. (1.5), la fórmula LK para las OM en sistemas bidimensionales tiene la expresión general^[83]

$$M_{osc}^{LK}(T, \Gamma) \sim \sum_{p=1}^{\infty} R_T(p) R_{\Gamma}(p) \cdots \frac{1}{\pi p} \text{sen}(2\pi pX), \quad (1.9)$$

donde $R_T(p)$ y $R_{\Gamma}(p)$ son los factores de reducción debido a la temperatura e impurezas (Γ es el parámetro de ensanchamiento), y los puntos suspensivos indican cualquier otro factor de reducción debido a otros efectos de decaimiento. La fórmula LK es particularmente útil cuando $R_T(p)$ y/o $R_{\Gamma}(p)$ decrecen rápido con p , de manera que solo los primeros armónicos tienen amplitud apreciable. En dicho caso las OM pueden tratarse prácticamente como simple armónicas, como es usualmente el caso en los metales 3D^[102,103].

El factor de reducción $R_T(p)$ depende de la distribución de Fermi-Dirac, la cual dicta cómo se ocupan los niveles de energía a temperatura finita. Como sucede con todos los factores de reducción, $R_T(p)$ depende a su vez del sistema, es decir, de los niveles de Landau. Para NL clásicos del tipo $\varepsilon_n = aB(n + 1/2)$, se tiene^[83]

$$R_T^c(p) = \frac{2\pi^2 p k_B T / aB}{\sinh(2\pi^2 p k_B T / aB)}. \quad (1.10)$$

Éste es el tipo de factor de reducción de temperatura para las OM en metales 3D, teniendo en cuenta que en general a es la energía de ciclotrón, con expresión $a = e/\hbar m$, donde m es la masa de ciclotrón. Esto implica que, para masas de ciclotrón m no muy distintas de la masa del electrón libre m_e , en situaciones típicas de T y B se tiene $2\pi^2 p k_B T / aB \gtrsim 1$. En dicho caso se puede aproximar

$$R_T^c(p) = \frac{4\pi^2 p k_B T}{aB} \exp(-2\pi^2 p k_B T / aB), \quad (1.11)$$

lo cual simplifica considerablemente la fórmula LK. Así, asumiendo que no hay impurezas (es decir $R_{\Gamma}(p) = 1$), la sumatoria de la fórmula LK se puede resolver para el factor (1.11), lo cual no es posible considerando el factor general (1.10). Además, la aproximación que surge de $2\pi^2 p k_B T / aB \gtrsim 1$ implica que $R_T^c(p)$ decae rápidamente con p , de manera que solo los primeros armónicos contribuyen apreciablemente en la fórmula LK. En consecuencia es buena aproximación tratar las OM en los metales 3D como simple armónicas.

1. Introducción

El factor de reducción de la temperatura también ha sido obtenido recientemente para el grafeno y demás materiales 2D. En grafeno, para NL relativistas del tipo $\varepsilon_n = a\sqrt{Bn}$, Sharapov *et al.* obtuvieron^[86]

$$R_T^g(p) = \frac{4\pi^2 p k_B T \mu / a^2 B}{\sinh(4\pi^2 p k_B T \mu / a^2 B)}. \quad (1.12)$$

Notar que, a diferencia del caso clásico, para NL relativistas $R_T(p)$ depende del potencial químico μ . Esto tiene importantes consecuencias en la reducción del OM debido al incremento de la temperatura.

Además de la temperatura, el otro efecto importante en el decaimiento de las OM son las impurezas. En efecto, la mayoría de los sistemas nunca son perfectamente prístinos, sino que suelen tener algún residuo de impurezas. Esto afecta las propiedades electrónicas y magnéticas del sistema al producirse un *scattering* de los electrones con las impurezas^[104]. En un campo magnético, el resultado de este *scattering* es que el tiempo de relajación de los electrones tiende a ensanchar la densidad de estados de cada nivel de Landau^[105]. Cualitativamente, la razón de este ensanchamiento puede relacionarse con el principio de incertidumbre^[76], el cual implica que debido al *scattering* de los electrones hay una incerteza (tiempo de relajación) de la energía de los electrones sobre cada nivel Landau. El ensanchamiento de la DOS, para cada NL, da lugar a una reducción de la amplitud de las OM.

La forma del ensanchamiento de la DOS de los NL depende, en general, del mecanismo de *scattering* en presencia de un campo magnético^[104,106,107]. Éste es un problema complejo, tal que actualmente no hay un consenso sobre cómo es dicho mecanismo. Sin embargo, en la práctica se suele recurrir a ensanchamientos siguiendo distribuciones conocidas. La más común, que ha sido empleada casi de manera unánime en las OM, es la distribución de Lorentz^[83]. Esta distribución surge naturalmente del tratamiento del *scattering* de impurezas por medio del principio de incertidumbre, como desarrolló por primera vez Dingle, quién demostró que para un electrón en un nivel de energía ε_r , la probabilidad de que la energía esté entre ε y $\varepsilon + d\varepsilon$ es^[105]

$$P(\varepsilon + d\varepsilon) \sim \frac{d\varepsilon}{(\varepsilon - \varepsilon_r)^2 + (\hbar/2\tau)^2}, \quad (1.13)$$

donde τ es el tiempo de relajación del electrón. Dicha probabilidad conduce naturalmente a la distribución de Lorentz para la DOS del nivel de energía ε_r . De esta manera, para NL clásicos $\varepsilon_n = aB(n + 1/2)$ se obtiene el famoso factor de reducción de Dingle de la fórmula LK^[101]

$$R_T^D(p) = \exp(-2\pi^2 p k_B T_D / aB), \quad (1.14)$$

1. Introducción

donde se definió $T_D = \hbar/2\pi k_B \tau$ a la temperatura de Dingle. Una de las ventajas de utilizar la distribución de Lorentz es que, además de que en general se ajusta relativamente bien a los resultados experimentales en metales 3D, los cálculos analíticos suelen ser más sencillos que si se utilizase otra distribución. Esto surge de que la distribución de Lorentz decae lentamente, lo cual es naturalmente beneficioso en el marco de la fórmula LK. En otras palabras, el factor de reducción $R_{\Gamma}^D(p)$ decae rápidamente con p . En efecto, mientras menos extendida es la función distribución para la DOS de los NL, más lentamente decae $R(p)$ con p . Por lo tanto, al utilizar el factor de Dingle $R_{\Gamma}^D(p)$ se necesitan menos armónicos para que la fórmula LK converja. Más aún, en el caso de temperatura nula, es fácil comprobar que la fórmula LK tiene solución analítica para el factor de Dingle $R_{\Gamma}^D(p)$, lo cual no sucede para los factores de reducción asociados a distintas distribuciones.

El factor de Dingle, para impurezas con distribución de Lorentz, también ha sido recientemente obtenido para grafeno y demás materiales 2D. En particular, Sharapov *et al.* obtuvieron^[86]

$$R_{\Gamma}^D(p) = \exp(-4\pi^2 p k_B T_D \mu / a^2 B), \quad (1.15)$$

donde $T_D = \Gamma/\pi k_B$ es la temperatura de Dingle, siendo Γ el ensanchamiento de la distribución de Lorentz. Notar que, al igual que sucede con el factor de temperatura [ec. (1.12)], el factor de Dingle para NL relativistas depende del μ , a diferencia de lo que sucede para NL clásicos.

A pesar de que usualmente se suelen tratar las impurezas, en la fórmula LK, usando el factor de Dingle, esto es en parte debido a una conveniencia en los cálculos^[86]. Puesto que no hay consenso sobre cómo es el mecanismo de *scattering*, bien podría ser que otras distribuciones de impurezas sean más adecuadas. De hecho, uno podría argumentar que el tipo de distribución a utilizar depende del sistema en particular. Esto puede ser particularmente relevante en los materiales 2D puesto que presentan características únicas en comparación con el típico metal 3D. Así, podría ser que el *scattering* de los electrones en un campo magnético no tenga como resultado una distribución de tipo Lorentz^[104]. Más aún, en el caso general uno esperaría que la distribución de impurezas resulte en una DOS que depende del campo magnético y del nivel de energía^[108]. Por ejemplo, Yang *et al.* estudiaron el *scattering* de electrones con impurezas cargadas en grafeno, en un campo magnético, obteniendo una DOS semi-elíptica para cada NL^[109]

$$\rho_n(\varepsilon) = \frac{g_s g_v}{2\pi l_B^2 \pi \Gamma_n} \operatorname{Re} \left[1 - \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_n}{2\Gamma_n} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (1.16)$$

donde g_s y g_v son las degeneraciones de espín y valle, y l_B es la longitud magnética. Lo interesante aquí es que esta DOS no solo difiere substancialmente de cómo es la distribución

1. Introducción

de Lorentz, sino también que el parámetro de ensanchamiento Γ_n depende del NL ε_n (es decir, depende del índice n) y del campo magnético B . Este tipo de dependencias en la DOS no están naturalmente contempladas en la fórmula LK, en particular la dependencia del ensanchamiento con los NL. En consecuencia resulta necesaria una formulación más general de la fórmula LK, considerando la funcionalidad general que puede tener la distribución de impurezas en los materiales 2D.

1.3.4. Limitaciones de la fórmula LK

La fórmula LK ha tenido gran éxito en la explicación de la reducción de las OM debido a los efectos de decaimiento en los metales 3D, para los cuales fue originalmente desarrollada. Sin embargo, uno podría decir que presenta algunas limitaciones a la hora de extender su aplicación a los materiales 2D. Una de ellas fue ya discutida en la sección previa, donde se indicó que el uso del factor de Dingle para tratar las impurezas podría no ser adecuado en los materiales 2D, debido a la dependencia del ensanchamiento con el índice de NL, algo que la fórmula LK no considera. Otra limitación, de origen más práctico, tiene que ver con la efectividad del uso de la fórmula LK en los materiales 2D, a bajo decaimiento. En efecto, debido a la alta energía de ciclotrón en los materiales 2D (en grafeno es dos ordenes de magnitud mayor que en un 2DEG^[16,82]), y la naturaleza 2D de las oscilaciones, que son discontinuas en el estado fundamental, el decaimiento de las OM es considerablemente menor que en el típico metal 3D, para valores similares de T , Γ y B . Esto implica que a bajo decaimiento, donde son apreciables los fenómenos de desdoblamiento de espín o el mezclado de valle^[88] (en los materiales 2D con *buckling*, por ejemplo), uno no puede tratar las oscilaciones como simple armónicas, como usualmente se hace al emplear la fórmula LK^[83]. En otras palabras, se necesitan muchos términos armónicos para converger la serie de la fórmula LK, lo cual naturalmente dificulta el análisis analítico.

Por ejemplo, considerar NL relativistas del tipo $\varepsilon_n = a\sqrt{Bn}$ en el caso prístino. La fórmula LK es^[86]

$$\frac{M_{osc}}{A} = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{4\pi^2 p k_B T \psi / \mu}{\sinh(4\pi^2 p k_B T \psi / \mu)} \frac{\text{sen}(2\pi p \psi)}{\pi p}, \quad (1.17)$$

donde $A = -2\mu e/h$ es la amplitud de las OM en el estado fundamental, y definimos $\psi = \mu^2/a^2 B$ a la fase de las OM [ver ec. (1.6)]. En la Fig. 1.1 se muestran las OM dadas por la ec. (1.17), para diferentes temperaturas, considerando la suma de los primeros p_M armónicos. A bajas temperatura, $T = 1$ K, el decaimiento de las OM debido a la temperatura no es muy grande y por lo tanto son necesarios varios términos p_M para converger la fórmula LK. Vale notar, además, que a esta temperatura no se satisface $4\pi^2 p k_B T \psi / \mu \gtrsim 1$, de manera que el factor de reducción de temperatura no se puede simplificar como en la ec. (1.11). En cambio, para mayor temperatura $T = 7$ K, el decaimiento es más significativo y la reducción de las

1. Introducción

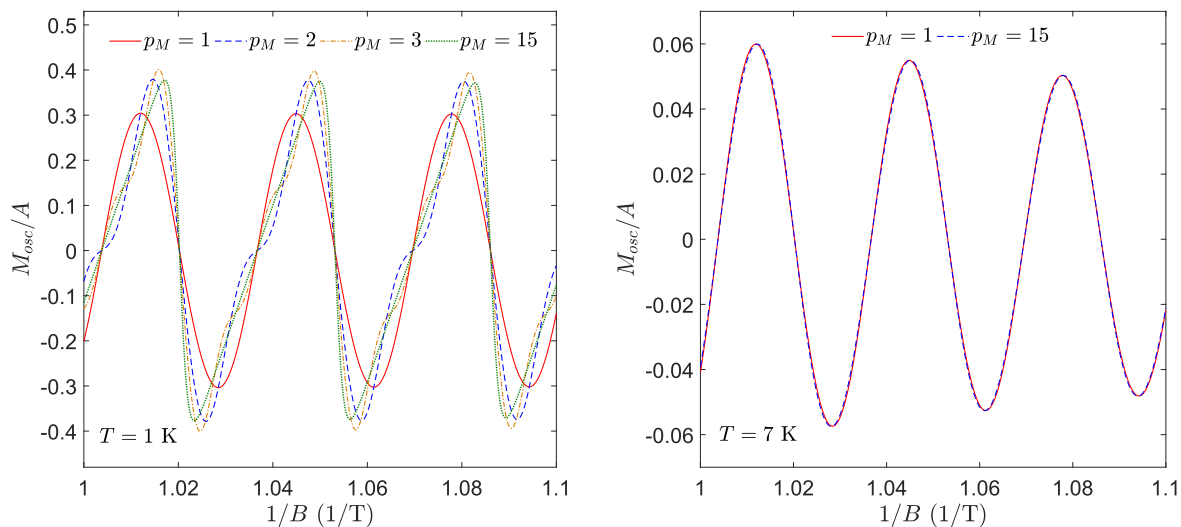


Figura 1.1: OM dadas por la fórmula LK (1.17) en grafeno prístino con $\mu = 0,2$ eV, para $T = 1$ K y $T = 7$ K. En cada caso se muestra la suma de los primeros p_M armónicos.

OM es más pronunciada. En tal caso vemos que la fórmula LK prácticamente ya converge con solo el primer armónico. En otras palabras, en este región (y para temperaturas mayores), es buena aproximación tratar las OM como simple armónicas.

1.4. Momentos magnéticos

Los momentos magnéticos locales son, como su nombre indica, presencia de magnetismo alrededor de una impureza diluida en una aleación. Este comportamiento fue observado experimentalmente por Friedel *et al.* en diversos experimentos realizados a fines de los años 50^[110–113]. Posteriormente, experimentos realizados por Mathias *et al.* mostraron la aparición de momentos magnéticos locales en iones de hierro disueltos en metales no magnéticos^[114]. Estos experimentos, que median la susceptibilidad, describían la aparición y desaparición de los momentos magnéticos como función de una variación continua de la solubilidad del metal. Para ello se empleaban técnicas de difracción de neutrones, a partir de la cual es posible observar directamente los momentos magnéticos, y calcular su distribución alrededor de la impureza^[114]. Así, se obtienen regiones bien definidas donde existe formación de momentos magnéticos, y regiones donde no hay momentos magnéticos, siendo la transición entre dichas regiones prácticamente continua.

La descripción y explicación teórica de la formación de los momentos magnéticos no es sencilla. La razón es que los momentos magnéticos no pueden ser descritos usando la teoría del electrón libre (sin interacción con los demás electrones), como se suele hacer al estudiar las propiedades de un metal no magnético^[83,85]. A su vez, en el marco de la teoría

1. Introducción

de Hartree-Fock^[115,116] (HF), es difícil describir la ocupación de solo espines paralelos en un ión. Estas cuestiones sugieren usar un procedimiento análogo al empleado en los materiales magnéticos: los estados magnéticos dependen fuertemente de la interacción de Coulomb de los electrones en las capas internas^[117], que por lo tanto debe ser incluida explícitamente en el modelo de HF. El resultado es que los campos de HF, para cada espín, difieren no solo en las integrales de intercambio, sino también en las integrales de Coulomb que representan la verdadera interacción electrón-electrón.

1.4.1. Momentos magnéticos en metales

El primer modelo para describir la formación de momentos magnéticos locales en iones solubles, teniendo en cuenta la interacción Coulombiana de los electrones en las capas internas, fue propuesto por Paul W. Anderson en 1961^[118]. El modelo consiste en un cálculo autoconsistente para encontrar si los momentos magnéticos existen, en función de los parámetros del sistema. Siguiendo a Anderson, la idea del modelo es la siguiente: si existe un momento magnético, entonces un estado ϕ_d de una capa d en el átomo de la impureza está lleno para el espín up y vacío para el espín down. Incluyendo en el campo de Hartree la energía repulsiva dentro de la capa d , un electrón con espín down verá la repulsión del electrón extra con espín up, pero los electrones con espín up no la verán, puesto que no tienen una energía de intercambio^[117]. Por lo tanto, si la energía sin perturbar del estado con espín up se encuentra una distancia E debajo de la superficie de Fermi, entonces la energía del estado localizado con espín down estará a una energía $-E + U$, donde U es la energía de repulsión debido a la interacción electrónica $d - d$ en la capa d . Como asumimos el estado espín down vacío, dicha energía debe estar por encima del nivel de Fermi.

Ahora bien, considerar que hay un cambio en el número de electrones d (electrones en la capa d). En términos de la energía de repulsión U , este cambio en la ocupación produce que disminuya la diferencia U entre las energías para espín up y down: para espín up, la energía aumenta de $-E$ a $-E + \delta n U$, mientras que para espín down la energía decrece de $-E + U$ a $-E + U(1 - \delta n)$. El valor de δn depende de la densidad de los electrones d libres, de la hibridización de éstos con la impureza y de la diferencia entre la energía para los espines up y down. Si entonces al variar cualquiera de estos parámetros δn se incrementa, luego la diferencia de energía para cada espín en la impureza disminuye, lo cual eventualmente lleva a una desaparición del momento magnético.

Siguiendo estas ideas, Anderson propone un modelo que tiene en cuenta la hibridización de la impureza con la red, junto con la correlación electrónica en la misma. Como resultado obtiene expresiones analíticas para la ocupación promedio $\langle n_{d,\sigma} \rangle$ de cada espín $\sigma = \pm 1$ en la impureza, a partir de lo cual se puede analizar la formación de momentos magnéticos (i.e. cuándo $\langle n_{d,\uparrow} \rangle \neq \langle n_{d,\downarrow} \rangle$). Un ejemplo sencillo ocurre cuando la hibridización es tal que

1. Introducción

el residuo de la energía es despreciable, y la autoenergía es constante. En tal caso Anderson obtiene la ocupación en cada espín^[118]

$$\langle n_{d,\sigma} \rangle = \frac{1}{\pi} \cot^{-1} \left[\frac{E - \mu + U \langle n_{d,-\sigma} \rangle}{\Delta} \right], \quad (1.18)$$

donde E es la energía en la impureza, μ la energía de Fermi y Δ la energía de hibridización. Aún sin resolver autoconsistentemente la ecuación anterior, las regiones para las cuales se espera o no momento magnético pueden estimarse al graficar $\langle n_{d,\sigma} \rangle$ en función de $\langle n_{d,-\sigma} \rangle$, para diferentes valores de Δ , μ y U . Luego, cuando las funciones $\langle n_{d,\sigma} \rangle$ y $\langle n_{d,-\sigma} \rangle$ se cruzan se puede decir que no existe formación de momento magnético local. Siguiendo esta idea, Anderson define las variables adimensionales $y = U/\Delta$ (que estima la relación entre la integral de Coulomb y el ancho de la DOS en la impureza) y $x = (\mu - E)/U$. Así, cuando $x = 1/2$, las energías E y $E + U$ para cada espín se encuentran a distancias simétricas de la energía de Fermi μ , lo cual es más favorable para la existencia de magnetismo.

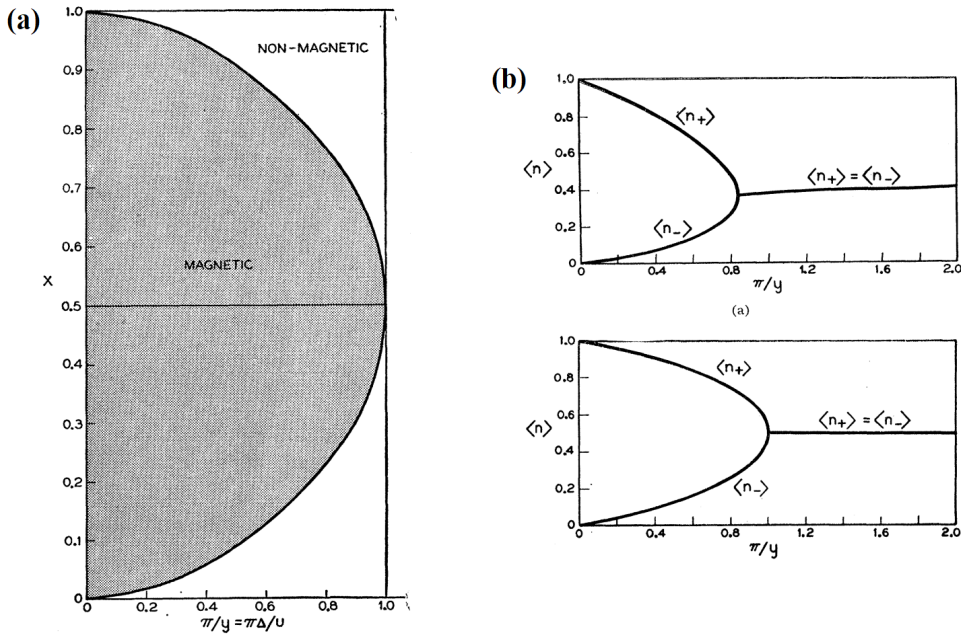


Figura 1.2: (a) Curva de transición entre las regiones magnéticas y no magnéticas, en función de las variables $y = U/\Delta$ y $x = (\mu - E)/U$. (b) $\langle n_{d,+} \rangle$ y $\langle n_{d,-} \rangle$ como función de la variable π/y , para $x = 1/2$ (superior) y $x = 1/4$ (inferior). Tomado de [118].

En función de las variables x e y se puede trazar una curva de transición entre comportamiento magnético y no magnético (por supuesto, en la curva de transición se cumple $\langle n_{d,+} \rangle = \langle n_{d,-} \rangle$). El resultado puede verse en la Fig. 1.2(a), obtenida por Anderson para las ocupaciones dadas por la ec. (1.18). En dicho gráfico se muestran las regiones magnéticas

1. Introducción

(sombreado) y no magnéticas, en función de las variables x e π/y . Notar que la curva de transición es simétrica alrededor de $x = 1/2 = \pi/y$, en donde siempre hay magnetismo. Esto confirma lo mencionado arriba: el magnetismo es más favorable cuando las energías de cada espín son simétricas respecto de la energía de Fermi.

Otro gráfico instructivo es graficar $\langle n_{d,+} \rangle$ y $\langle n_{d,-} \rangle$ como función de la variable π/y , lo cual resulta en las gráficas de la Fig. 1.2(b), para $x = 1/2$ y $x = 1/4$ (figura superior e inferior, respectivamente). Estas gráficas nos dicen que solo hay magnetismo para $\pi/y \lesssim 1$, y que para $\pi/y > 1$ siempre se tiene $\langle n_{d,+} \rangle = \langle n_{d,-} \rangle$, i.e. la transición se da cuando $U \simeq \pi\Delta$. Para metales como el Cu, Anderson estima que esta relación está en buen acuerdo con lo esperado. En efecto, para elementos del grupo del hierro se espera $U \sim 10$ eV, mientras que $\Delta = \pi \langle V^2 \rangle \rho(\varepsilon) \sim 2 - 5$ eV (donde V es la energía de hibridización y $\rho(\varepsilon)$ es la DOS de los electrones libres s).

1.4.2. Momentos magnéticos en materiales 2D

El modelo de Anderson, originalmente concebido para describir la formación de momentos magnéticos en iones solubles en metales no magnéticos, puede ser directamente extendido a otros sistemas. Uno de estos sistemas son los materiales 2D como el grafeno. La cuestión resulta entonces estudiar cómo es la formación de momentos magnéticos para átomos adsorbidos sobre la red del grafeno (u otro material 2D como el siliceno). Al tratarse en un material puramente bidimensional, la adsorción es sobre una única superficie, de manera que uno puede distinguir entre adsorción en sitio *top*, *hollow* o *bridge*^[119]. Dependiendo del tipo de sitio de adsorción cambian las energía de hibridización y la cantidad de vecinos con los cuales la impureza interactúa^[120,121]. A su vez, las propiedades del momento magnético pueden ser manipuladas por medio de campos eléctricos externos^[64,122].

Algunos casos fueron recientemente estudiados. Uchoa *et al.* analizaron la formación de momentos magnéticos locales en grafeno, para la adsorción de una sola impureza en un sitio *top*, obteniendo una DOS en la impureza^[123]

$$\rho_{ff,\sigma}(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta |\omega| \theta(D - |\omega|)}{[Z^{-1}(\omega) \omega - \epsilon_\sigma]^2 + \Delta^2 \omega^2}, \quad (1.19)$$

donde $Z^{-1}(\omega) = 1 + (V/D)^2 \ln(|\omega^2 - D^2|/\omega^2)$ es el residuo y $\Delta = \pi(V/D)^2$ es el parámetro de hibridización adimensional ($D \sim 7$ eV es una energía de *cutoff*). La DOS $\rho_{ff,\sigma}(\omega)$ no es una Lorentziana, como ocurre en el caso de impurezas en metales^[118]. Integrando $\rho_{ff,\sigma}(\omega)$ desde $-D$ a μ se obtiene $\langle n_\sigma \rangle$, partir de lo cual se estudia la formación de momentos magnéticos de manera autoconsistente.

El resultado puede verse en la Fig. 1.3, que muestra la curva de transición entre las regiones magnéticas y no magnéticas, en función de $y = (\mu - \epsilon_0)/U$ y $x = D\Delta/U$. Notar

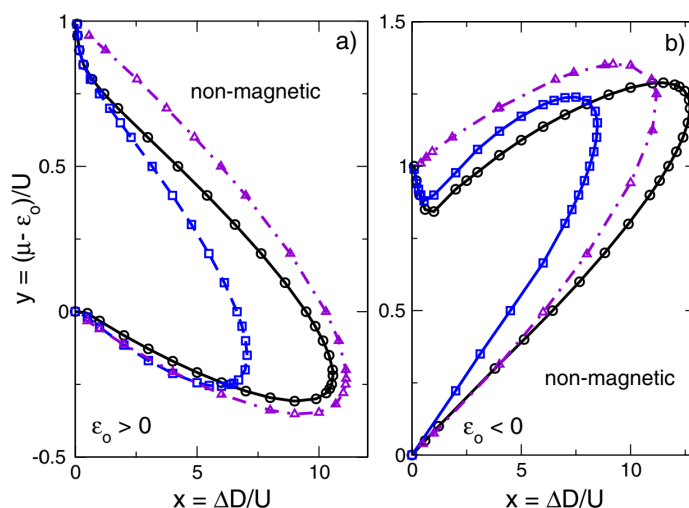


Figura 1.3: Curva de transición entre la regiones magnéticas y no magnéticas, para una impureza adsorbida en un sitio *top* en grafeno, como energía (a) $\epsilon_0 > 0$ y (b) $\epsilon_0 < 0$. Círculos: $|\epsilon_0|/D = 0,029$, $V/D = 0,14$; cuadrados: $|\epsilon_0|/D = 0,043$, $V/D = 0,14$; triángulos: $|\epsilon_0|/D = 0,029$, $V/D = 0,03$. Tomado de [123].

que la curva de transición no es simétrica para $\epsilon_0 > 0$ y $\epsilon_0 < 0$, es decir, energía de la impureza arriba o abajo del punto de Dirac (tomado como punto de referencia). A su vez, la curva no es simétrica alrededor $y = 0,5$, en contraste con el comportamiento en el caso metálico (Fig. 1.2). Esto se debe a la ruptura de la simetría electrón-hueco por la presencia del nivel de impureza. Para el caso $\epsilon_0 > 0$, Fig. 1.2(a), se observa que la curva de transición cruza $y = 0$, lo cual implica que hay magnetización cuando el nivel de la impureza se encuentra por debajo de la energía de Fermi μ . La razón puede atribuirse a que al gran ensanchamiento del nivel de la impureza, debido a la hibridización, de forma tal que $\rho_{ff,\sigma}(\omega)$ cruza μ aún cuando la energía de la impureza está por debajo de μ .

El estudio de la formación de momentos magnéticos en los materiales 2D es relevante para controlar y manipular las propiedades electrónicas. Estudios teóricos y experimentales indican que el dopaje sustitucional en materiales de carbono puede usarse para manipular sus propiedades físicas y/o químicas^[124,125]. En este sentido, se han realizados estudios teóricos sobre vacancias de carbono en grafeno^[126,127], adsorción de átomos de hidrógeno^[128], y diferentes tipos de desordenes^[129–132]. En cuanto a los posibles átomos adsorbidos, los metales de transición (MT) son relevantes en los campos de almacenamiento de hidrógeno^[133,134]. En efecto, el dopaje con MT preserva la integridad estructural de los nanomateriales de carbono, y por lo tanto pueden considerarse como gran alternativa para mejorar la capacidad de almacenamiento de hidrógeno^[135–139]. Más aún, el grafeno se ha vuelto un material muy importante para aplicaciones en espíntrónica^[140,141], debido a su débil interacción espín-órbita^[3,16], lo cual implica un largo tiempo de vida y relajación de espín, permitiendo controlar su transporte^[142–144]. A su vez, la adsorción de MT en grafeno promueve la formación de mo-

1. Introducción

mentos magnéticos locales debido a los estados d parcialmente ocupados^[145], lo cual permite diferenciar las propiedades de transporte entre diferentes canales de espín^[146]. Esto puede tener aplicaciones en nanomagnetos^[147] y almacenamiento de datos^[145].

En cuanto a la manipulación de los momentos magnéticos, los materiales 2D ofrecen la ventaja de que el nivel de Fermi puede controlarse fácilmente a través de un *gate voltage*^[148,149], lo cual no es posible en un material 3D. Por ejemplo, utilizando 300 nm de SiO₂ como material dieléctrico, un potencial de gate se puede aplicar entre la muestra de grafeno y los átomos magnéticos adsorbidos^[150]. El *gate voltage* aplicado puede desplazar el nivel de Fermi, creando una diferencia de potencial entre la muestra. Es bien sabido que un máximo decaimiento de voltaje ocurre a través de SiO₂, y que el factor de conversión desde el *gate voltage* a μ es muy pequeño ($\sim 0,003$). En tal caso, se necesitaría un *gate voltage* de 100 V para cambiar μ por 300 meV. Otra forma de manipular el nivel de Fermi es utilizando un *gate* electrolítico^[151,152], lo cual permite obtener una energía de Fermi $\mu = \hbar v_F \sqrt{\pi n_e}$, donde v_F es la velocidad de Fermi en grafeno y n_e es la densidad electrónica. Dicha densidad se manipula con el *gate voltage* como $V_G = \mu/e + n_e/C_{TG}$, donde e es la carga del electrón y C_{TG} es la capacitancia geométrica, la cual se puede aproximar como $C_{TG} = 2,2 \times 10^{-6} \text{ cm}^{-2}$ ^[150].

Capítulo 2

Métodos teóricos

En este capítulo se desarrollan los métodos teóricos utilizados en esta tesis. En primero lugar se define la magnetización promedio, distinguiendo su cálculo en los ensambles canónico y gran canónico. Se obtiene una expresión para el gran potencial debido a niveles de Landau degenerados, a partir de la cual se calcula la magnetización. A su vez, se desarrolla una expansión en series de Fourier para funciones que varían poco entre cada periodo de oscilación, lo cual será útil a la hora de extraer la parte oscilatoria de la magnetización. También se describe el origen de los factores de reducción en la fórmula LK.

Por otro lado, se describe el formalismo de la segunda cuantización, en función de operadores de creación y destrucción. Con esto se formula el modelo de *Tight Binding*, con el cual se pueden obtener las propiedades electrónicas en sólidos cristalinos fuertemente enlazados. Finalmente se describe teóricamente el Modelo de Anderson para estudiar la formación de momentos magnéticos locales.

2.1. Magnetización

En un sistema bidimensional de área \mathcal{A} , sujeto a un campo magnético perpendicular B , se define la magnetización promedio en la dirección del campo como^[153]

$$M \equiv \frac{1}{\mathcal{A}} \left\langle -\frac{\partial H}{\partial B} \right\rangle, \quad (2.1)$$

donde H es el Hamiltoniano del sistema en presencia del campo magnético. El promedio debe tomarse siguiendo los principios de la mecánica estadística^[154]. Así, si P_i es la probabilidad de ocupación del estado del sistema con energía E_i , se tiene

$$M = -\frac{1}{\mathcal{A}} \sum_i P_i \frac{\partial E_i}{\partial B}, \quad (2.2)$$

2. Métodos teóricos

donde la sumatoria en i es sobre todos los estados de energía E_i asociados al Hamiltoniano H . Para el ensamble canónico (EC), donde la cantidad de electrones N es fija, se tiene $P_i = e^{\beta F - \beta E_i}$, donde $F = U - TS$ es el potencial de Helmholtz. Para el ensamble gran canónico (EGC), donde la cantidad de electrones puede variar, se tiene $P_i = e^{\beta \Omega - \beta(E_i - \mu N_i)}$, donde $\Omega = F - \mu N$ es el gran potencial y μ el potencial químico. En consecuencia, la magnetización en cada caso se calcula como

$$M = -\frac{1}{\mathcal{A}} \left(\frac{\partial F}{\partial B} \right)_{N,T,\mathcal{A}} \quad (\text{EC}) \quad (2.3)$$

$$M = -\frac{1}{\mathcal{A}} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial B} \right)_{\mu,T,\mathcal{A}} \quad (\text{EGC}). \quad (2.4)$$

En principio, de las anteriores expresiones uno podría calcular la magnetización del sistema en función de la configuración del mismo, sea que mantiene o no la densidad electrónica constante. Sin embargo, los cálculos teóricos suele realizarse asumiendo un potencial químico μ constante. La razón es que las cuentas son mucho más fáciles de realizar en el ensamble gran canónico que en el ensamble canónico. En efecto, la restricción de N constante no es trivial ya que solo aparece implícitamente en la expresión de F . Esto es más prominente en el caso genérico de temperatura finita y/o impurezas en el sistema. En consecuencia, la consideración del caso N constante se suele realizar como en un gas cuántico, calculando cómo debe variar μ para que N sea constante^[153,154]. Un caso particular e importante, donde la restricción de N constante no es problemática, ocurre en el estado fundamental del sistema. En tal situación veremos que la restricción de N constante puede fácilmente considerarse con una ocupación parcial del último nivel de energía ocupado.

2.1.1. Gran potencial

Como se delineó en la introducción, en presencia de un campo magnético perpendicular se discretiza la energía en los niveles de Landau ε_n , cada uno con una degeneración $D = \mathcal{A}Bh/e$ (ver sección 1.3.1). Nos interesa entonces calcular el gran potencial Ω del sistema, trabajando en el ensamble gran canónico con un potencial químico constante μ . Para ello es necesario obtener primero la función gran partición \mathcal{Z} , dada por^[154]

$$\mathcal{Z} = \sum_i e^{-\beta(E_i - \mu N_i)}, \quad (2.5)$$

siendo la sumatoria es sobre todos los microestados i del sistema. En general $N_i = \sum_n r_{n,i}$ y $E_i = \sum_n r_{n,i} \varepsilon_n$, donde los factores $0 \leq r_{n,i} \leq D$ tienen en cuenta la ocupación de cada nivel. Cada estado con energía E_i corresponde a las distintas posibilidades que pueden tomar el conjunto de factores $\{r_{n,i}\}$; como no hay restricción en la cantidad de electrones (por

2. Métodos teóricos

trabajar en el ensamble gran canónico), podemos extender la sumatoria a todas las posibles configuraciones. Para ello debemos tener en cuenta todas las formas de distribuir r_n partículas indistinguibles en un total de D estados disponibles, lo cual está dado por el factor binomial $\binom{D}{r_n} = D! / (D - r_n)! r_n!$. Luego la función gran partición resulta

$$\mathcal{Z} = \prod_n \left[\sum_{r_n=0}^D \frac{D!}{(D - r_n)! r_n!} e^{-\beta r_n (\varepsilon_n - \mu)} \right] = \prod_n [1 + e^{-\beta(\varepsilon_n - \mu)}]^D, \quad (2.6)$$

donde en el último paso se utilizó el teorema del binomio. Por lo tanto el gran potencial $\Omega = -k_B T \ln \mathcal{Z}$ queda

$$\Omega = -k_B T D \sum_n \ln [1 + e^{\beta(\mu - \varepsilon_n)}]. \quad (2.7)$$

Vale destacar que esta expresión simple para Ω es posible puesto que en el ensamble gran canónico la cantidad de electrones N puede variar al mantener μ constante. En contraste, la restricción de N constante hace prácticamente intratable el problema de calcular la función partición de manera general, como se hizo con la función gran partición, puesto que al considerar las energías $E_i = \sum_n r_{n,i} \varepsilon_n$, se debe imponer la condición $N_i = \sum_n r_{n,i}$ constante, para todas las posibles configuraciones. Solo en el estado fundamental esta restricción no es problemática, dado que entonces el sistema se encuentra en equilibrio en la mínima energía posible.

El gran potencial dado por la ec. (2.7) es válido para el caso del sistema prístino, donde la densidad de estados (DOS) son deltas de Dirac alrededor de cada NL ε_n , i.e. $\rho(\varepsilon) = D \sum_n \delta(\varepsilon - \varepsilon_n)$. En el caso general del sistema impuro, los niveles de energía se ensanchan en función del *scattering* de los electrones con las impurezas^[104]. La DOS de cada NL pasa a ser una distribución, que dependiendo del sistema en cuestión puede ser tipo Lorentz, Gauss o semi-elíptica, entre otras. La DOS total del sistema resulta entonces $\rho(\varepsilon) = D \sum_n \rho_n(\varepsilon - \varepsilon_n)$, donde ρ_n es la DOS sobre cada NL. El correspondiente gran potencial puede obtenerse de la ec. (2.7), reemplazando la sumatoria sobre los niveles discretos con una integral en energía considerando la DOS con impurezas. Así, en el caso general el gran potencial del sistema es

$$\Omega = -k_B T D \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\varepsilon) \ln [1 + e^{\beta(\mu - \varepsilon)}] d\varepsilon. \quad (2.8)$$

Esta expresión de Ω es la ecuación fundamental para obtener las oscilaciones magnéticas, a partir de la ec. (2.4). Es válida en el caso general de temperatura finita T e impurezas con una DOS $\rho(\varepsilon) = D \sum_n \rho_n(\varepsilon - \varepsilon_n)$, siendo en general ρ_n una distribución simétrica sobre cada NL. Cuál distribución es la adecuada depende de cómo es el mecanismo de *scattering* en el sistema en cuestión^[104].

2. Métodos teóricos

En general conviene distinguir entre la situación en el estado fundamental del caso de temperatura finita y/o impurezas (los cuales denotamos como efectos de decaimiento). La distinción no solo es útil porque el primer caso facilita las cuentas, sino también porque los efectos de decaimiento usualmente se ven como una reducción de las oscilaciones cuánticas en el estado fundamental. Así, simplemente entendiendo cómo es el perfil de las oscilaciones en el estado fundamental ya se puede obtener una buena idea de cómo son las OM en el sistema, incluso en presencia de efectos de decaimiento.

2.1.2. Estado fundamental

El estado fundamental corresponde al sistema prístino a temperatura nula. En tal caso $\beta \rightarrow \infty$ y $\rho(\varepsilon) = \sum_n D\delta(\varepsilon - \varepsilon_n)$, por lo que la ec. (2.8) queda

$$\Omega = \sum_{n \leq f} D(\varepsilon_n - \mu), \quad (2.9)$$

donde f es el último NL ocupado tal que $\varepsilon_f \leq \mu < \varepsilon_{f+1}$. El cálculo de Ω depende, naturalmente, de cómo son los NL del sistema, y en particular de cómo están ordenados. En efecto, en la ec. (2.9), al ser el estado fundamental, se debe sumar sobre los NL ordenados de menor energía, de forma tal que la energía del sistema es la mínima posible. Esto no es problema cuando se tienen niveles de energía con solo un índice o variable, por ejemplo, como es la situación típica al considerar los NL con índice n y variable B . Sin embargo, al considerar la posible dependencia de los niveles de energía con distintos índices (valle o espín), u otras variables además del campo magnético perpendicular B (por ejemplo campo eléctrico perpendicular^[155]), la situación no es trivial puesto que el ordenamiento de los niveles de energía depende de la magnitud de estas variables. Esto es importante ya que el valor del campo B para cual los niveles de energía cruzan el potencial químico μ determina cuándo se producen las oscilaciones, y con qué amplitud.

Para calcular Ω se han utilizado, en general, diferentes métodos, aunque el más común es recurrir a la fórmula de Euler-Maclaurin que transforma la sumatoria en una integral^[156,157]. Este método es exacto para funciones polinómicas de orden menor que 3, como en efecto es el caso de los NL clásicos que son lineales como función del índice de Landau n . Sin embargo, en la situación más general no es claro qué tan buena aproximación resulta utilizar la fórmula de Euler-Maclaurin. Por ejemplo, para NL relativistas se tiene una función con una dependencia del tipo \sqrt{n} con el índice de Landau. En consecuencia resulta difícil generalizar el uso de la fórmula de Euler-Maclaurin para NL 2D generales, que pueden depender no solo de n y B , sino también de otros índices o variables en el sistema^[155,158,159]. Como se verá en los próximos capítulos, parte de esta tesis se basa en emplear un nuevo método para el cálculo de Ω y, en particular, las oscilaciones magnéticas que se obtiene derivando respecto de B .

2. Métodos teóricos

A partir de Ω , la magnetización se calcula como $M = -\mathcal{A}^{-1} (\partial\Omega/\partial B)_\mu$ [ec. (2.4)]. Como se indicó en la introducción, en dos dimensiones la magnetización tiene la peculiaridad de que las oscilaciones en el estado fundamental son discontinuas, lo cual no ocurre en sistemas 3D^[83]. Esta discontinuidad en las OM puede entenderse, de manera cualitativa, teniendo en cuenta la discretización de los niveles de energía. De la expresión general (2.9) es fácil ver que derivando respecto de B resulta

$$\left(\frac{\partial\Omega}{\partial B}\right)_\mu = \frac{\Omega}{B} + \sum_{n \leq f} D \left(\frac{\partial\varepsilon_n}{\partial B}\right), \quad (2.10)$$

donde se utilizó que $\partial D/\partial B = D/B$. Así vemos que, puesto que Ω es una función continua, entonces las discontinuidades en M provienen del último término en la ecuación anterior, es decir, de $\sum_{n \leq f} D (\partial\varepsilon_n/\partial B)$. En particular, puesto que las discontinuidades ocurren cuando el último nivel ocupado cambia y entonces f varía, se puede inferir que la amplitud de las discontinuidades depende de $D (\partial\varepsilon_f/\partial B)$. A lo largo de esta tesis veremos que este simple cálculo permite obtener, de manera directa y sencilla, cómo es la amplitud de las OM para cualquier tipo de niveles energía, incluso considerando que pueden depender del valle, del espín, y/o otras variables además del campo magnético.

Hasta el momento la descripción ha sido en el ensamble gran canónico, considerando un potencial químico constante μ . Esto implica, sin embargo, que al variar el campo magnético necesariamente cambia la cantidad de electrones N en el sistema^[83]. En efecto, considerando que todos los niveles de energía $\varepsilon_n \leq \mu$ están ocupados completamente con D electrones, como se asume en el cálculo de la ec. (2.9), cuando f niveles están ocupados hay Df electrones. Ahora bien, si el campo varía tal que aumenta la cantidad de niveles ocupado (digamos $f \rightarrow f + 1$, lo cual implica que B disminuyó), entonces la cantidad de electrones pasa a ser $D(f + 1)$. Así vemos que no solo la cantidad de electrones N varía, sino que en el estado fundamental lo hace de manera discontinua^[85]. A su vez, esto nos dice que para que N se mantenga constante, μ debe variar con B de manera discontinua en el estado fundamental. Por lo tanto, es importante discernir entre los dos casos de μ constante o N constante en los materiales 2D.

Las oscilaciones discontinuas de N en el estado fundamental, para μ constante, parecerían indicar que no hay manera de que se pueda encontrar, con la relación $N = -(\partial\Omega/\partial\mu)$, un potencial químico que oscile de manera tal que N se mantenga constante. El problema reside en que al asumir μ constante, en la ec. (2.9), se consideró que todos los niveles de energía menores que μ están completamente llenos (cada uno con D electrones). Esto es naturalmente incorrecto en el caso de considerar al sistema con N constante, puesto que en el estado fundamental el último nivel ocupado debe tener, en general, una ocupación parcial.

2. Métodos teóricos

Esta ocupación parcial permite, de manera natural, considerar que N se mantiene constante al variar el campo magnético.

De esta manera, para el caso N constante en el estado fundamental resulta conveniente trabajar en el ensamble canónico, considerando una ocupación parcial para el último NL ocupado. La variable fundamental es la energía libre $F = U - TS$, igual a la energía interna U en el estado fundamental ($T = 0$). Así, la energía del sistema en general es

$$U = \sum_{n=0}^{q-1} D\varepsilon_n + D\theta\varepsilon_q, \quad (2.11)$$

dondeⁱ $q = \text{floor}[N/D]$ son la cantidad de NL totalmente ocupadosⁱⁱ, y $D\theta = N - Dq$ es la ocupación parcial del último NL ε_q ocupado (notar que $0 \leq \theta \leq 1$). Al igual que en el cálculo de la ec. (2.9), el cálculo de U depende de cómo están ordenados los niveles de energías, puesto que la energía interna en el estado fundamental debe ser la mínima posible^[160]. Es decir, en la situación general la expresión de U , y de las resultantes oscilaciones cuánticas, depende del ordenamiento de los NL.

Es instructivo ver que de la expresión (2.11) se puede inferir que para N constante el potencial químico es igual al último NL parcialmente ocupado ε_q . En efecto, considerando la relación $\Omega = U - N\mu$, válida para $T = 0$, y considerando $\Omega = \sum_{n=0}^f D(\varepsilon_n - \mu)$ e identificando $f + 1 = q$ como el número de NL totalmente ocupados, se obtiene

$$U = \sum_{n=0}^{q-1} D\varepsilon_n + (N - Dq)\mu, \quad (2.12)$$

lo cual, comparando con la ec. (2.11), implica que $\mu = \varepsilon_q$. Así, para N constante μ oscila con el campo y lo hace de manera discontinua puesto que $q = \text{floor}[N/D]$.

La magnetización en el estado fundamental, para el caso N constante, se calcula de la energía interna U como $M = -\mathcal{A}^{-1}(\partial U/\partial B)_N$ [ec. (2.3)]. Como se hizo en el caso μ constante, el origen de las discontinuidades en M pueden entenderse cualitativamente derivando la ec. (2.11). Teniendo en cuenta que por definición $N = Dq + D\theta$, se tiene $\theta = N/D - q$ y entonces $\partial\theta/\partial B = -N/DB$. Luego se obtiene

$$\left(\frac{\partial U}{\partial B}\right)_N = \frac{U}{B} + \sum_{n=0}^{q-1} D \left(\frac{\partial \varepsilon_n}{\partial B}\right) + D\theta \left(\frac{\partial \varepsilon_q}{\partial B}\right) - \frac{N}{B}\varepsilon_q. \quad (2.13)$$

ⁱDefinimos aquí la función floor (función *piso* o *suelo*), la cual toma un número real y devuelve un número entero próximo, sea por exceso o por defecto. Por ejemplo $\text{floor}[2,3] = 2 = \text{floor}[2,9]$, y $\text{floor}[3,1] = 3$.

ⁱⁱEsto es asumiendo que todos los NL tienen degeneración D , como sucede en el caso clásico^[104]. En los materiales 2D el NL $n = 0$ tiene, de hecho, degeneración $D/2$ para los electrones de conducción^[82] (la otra mitad ocupada por huecos o electrones de valencia), de manera que la expresión de U debe modificarse de manera acorde.

2. Métodos teóricos

Ahora bien, considerando el caso simple de que $(\partial\varepsilon_n/\partial B) = b\varepsilon_n/B$, donde b es una constanteⁱ, se obtiene $(\partial U/\partial B)_N = U(1+b)/B - N\varepsilon_q/B$. Por lo tanto, como U es una función continua, se infiere que las discontinuidades en M , para el caso N constante, se deben a los cambios discontinuos en ε_q , debidos a que los NL son discretos. Esto sucede siempre que q cambia.

2.1.3. Expansión en series de Fourier

En general resulta conveniente expandir las oscilaciones magnéticas en series de Fourier, en especial puesto que, como veremos, las expresiones para la magnetización tienen la particularidad de que varían poco entre cada oscilación. Es decir, el perfil de las oscilaciones está determinado por cómo son la amplitud y la frecuencia de las mismas. En tal caso, sabiendo dichas variables es posible escribir de manera directa la serie de Fourier para la parte oscilante de la magnetización, o en general de los potenciales termodinámicos.

Para ver esto, consideramos en general una función real $f(x)$ para $x \in [x_0, x_0 + T)$, tal que fuera de este intervalo f es una función periódica con periodo T , $f(x) = f(x + T)$ para todo x . En general $x_0 = lT + \phi$, donde l es un entero y ϕ una fase constante. Por simplicidad, y sin pérdida de generalidad, consideramos el cambio de variable $x \rightarrow x - \phi$ a fin de eliminar esta fase. Luego, puesto que f es periódica, tenemos la expansión en Fourier^[87]

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{p=1}^{\infty} \left[a_p \cos\left(\frac{2\pi px}{T}\right) + b_p \sin\left(\frac{2\pi px}{T}\right) \right], \quad (2.14)$$

donde

$$a_0 = \frac{2}{T} \int_{x_0}^{x_0+T} f(x) dx \quad (2.15)$$

$$a_p = \frac{2}{T} \int_{x_0}^{x_0+T} f(x) \cos\left(\frac{2\pi px}{T}\right) dx \quad (2.16)$$

$$b_p = \frac{2}{T} \int_{x_0}^{x_0+T} f(x) \sin\left(\frac{2\pi px}{T}\right) dx. \quad (2.17)$$

Si la función f varía poco en el intervalo $x \in [x_0, x_0 + T)$, se puede tomar la aproximación cuadrática

$$f(x) \simeq f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + f''(x_0)(x - x_0)^2/2. \quad (2.18)$$

ⁱEste es el caso para los NL clásicos $\varepsilon_n = aB(n + 1/2)$, donde $(\partial\varepsilon_n/\partial B) = \varepsilon_n/B$ ($b = 1$), o los NL relativistas $\varepsilon_n = a\sqrt{Bn}$, donde $(\partial\varepsilon_n/\partial B) = \varepsilon_n/2B$ ($b = 1/2$). Para NL más genéricos, como ocurren en los materiales 2D con *buckling* como el siliceno, ya no se cumple $(\partial\varepsilon_n/\partial B) = b\varepsilon_n/B$. En dicho caso veremos que las discontinuidades M pueden tener otro origen además de los saltos discontinuos en ε_q .

2. Métodos teóricos

Reemplazando en a_p y b_p resulta

$$a_p = \frac{f''(x_0) T^2}{2(\pi p)^2} \quad (2.19)$$

$$b_p = -\frac{f'(x_0) T + f''(x_0) T^2/2}{\pi p}. \quad (2.20)$$

Por lo tanto la expansión en Fourier de f queda (omitiendo el factor constante a_0)

$$f \sim \sum_{p=1}^{\infty} \frac{C_1}{\pi p} \operatorname{sen} \left(\frac{2\pi p x}{T} \right) + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{C_2}{(\pi p)^2} \cos \left(\frac{2\pi p x}{T} \right), \quad (2.21)$$

donde $C_1 = -[f'(x_0) T + f''(x_0) T^2/2]$ y $C_2 = f''(x_0) T^2/2$ son factores independientes de p . De esta manera, la oscilación en f se escribe como contribuciones de funciones oscilantes elementales. Por ejemplo, la oscilación discontinua tipo *diente de sierra* está determinada por el coeficiente C_1 . En efecto, teniendo en cuenta la expresión de C_1 y la ec. (2.18), se tiene $C_1 = -[f(x_0 + T) - f(x_0)]$, lo cual determina la amplitud de la discontinuidad (si la hay) en la oscilación de f . Desde el punto de vista práctico, la expansión (2.21) es útil cuando se quiere determinar la parte oscilante de una función que varía poco sobre cada periodo, tal que la aproximación (2.18) es válida. La fase ϕ puede recobrase transformado hacia atrás $x \rightarrow x + \phi$. En el caso más general, la parte oscilante de f puede tener diferente amplitud entre distintos periodos sucesivos. Por ejemplo, una oscilación discontinua cuya amplitud varía con x . Esto puede generalizarse en la ec. (2.21) considerando que C_1 y C_2 dependen de x , lo cual implica obtener a_p y b_p para cada $x_0 = lT + \phi$ con diferente l . El resultado sería que los coeficientes dependen de x , pero las funciones seno y coseno se mantienen. Así, reagrupando se puede escribir f como en la ec. (2.21), con C_1 y C_2 dependiendo de x , representando la variación de f en cada periodo de oscilación.

La expansión (2.21) es útil para determinar fácilmente la parte oscilatoria de los potenciales termodinámicos y la magnetización. En efecto, como veremos en los próximos capítulos, en la mayoría de los casos estas funciones varían poco entre sucesivos periodos de oscilación, tal que su aproximación cuadrática es buena. Así, teniendo en cuenta que el gran potencial Ω (o la energía interna U para el caso N constante) varía necesariamente siempre de manera continua, la expansión (2.21) ya nos dice que $C_1 = 0$ y entonces a primer orden $\Omega_{osc} \sim \sum_{p=1}^{\infty} \cos(2\pi p \psi) / (\pi p)^2$, donde ψ es una función que define el periodo de las oscilaciones. Esto es, en efecto, lo que se obtiene al hacer explícitamente las cuentas en los casos particulares (ver sección 1.3.2). Análogamente, para la magnetización 2D en el estado fundamental, en la sección anterior vimos que las mismas son discontinuas, lo cual implica que $C_1 \neq 0$ y a primer orden $M_{osc} \sim \sum_{p=1}^{\infty} \operatorname{sen}(2\pi p \psi) / \pi p$. Esta expansión armónica de las OM

2. Métodos teóricos

es la base sobre la cual se describen los efectos de decaimiento como la temperatura finita e impurezas, como veremos a continuación.

2.1.4. Fórmula de Lifshitz-Kosevich

Los argumentos de la sección 2.1.2, válidos en el estado fundamental, permiten entender el origen de las oscilaciones magnéticas. En el caso general, a temperatura finita con impurezas, la magnetización sigue oscilando debido al mismo origen, pero con una amplitud reducida. Las discontinuidades en la magnetización desaparecen y la amplitud se reduce al aumentar la temperatura y/o impurezas. Una descripción cuantitativa de esto lo da la fórmula de Lifshitz-Kosevich (LK), la cual se basa en la descomposición armónica de las oscilaciones, considerando los efectos de decaimiento como factores de reducción [ec. (1.9)].

Existen diferentes métodos para obtener las expresiones de los factores de reducción $R(p)$. Uno de ellos, desarrollado por Shoenberg^[83], procura obtenerlos considerando el mezclado de fase debido a los efectos de decaimiento (*phase smearing* en inglés, lo cual abreviaremos como PS). La idea es que la fase de las oscilaciones (en general X) es variada sobre un pequeño rango alrededor del valor correspondiente en el estado fundamental. Cómo es esta variación depende, naturalmente, de qué efecto de decaimiento la causa. Notando a la fase $\psi = 2\pi pX$, la superposición de una distribución de las fases se puede considerar reemplazando $\cos \psi$ en la ec. (1.2) por

$$I = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \cos(\psi + \phi) D(\phi/\lambda) d\phi}{\int_{-\infty}^{\infty} D(\phi/\lambda) d\phi}, \quad (2.22)$$

donde ϕ indica el corrimiento de la fase respecto del valor ψ en el estado fundamental, y $D(\phi/\lambda)$ es una función de distribución que tiene en cuenta el PS, definido de forma tal que la probabilidad de encontrar a la fase entre ϕ y $\phi + d\phi$ es $D(\phi/\lambda) d\phi$. El término λ es un parámetro de escala que está relacionado con el ancho del PS. El denominador en la ec. (2.22) no es más que una normalización de la probabilidad. Ahora bien, definiendo $z = \phi/\lambda$, se puede escribir

$$I = \text{Re} \left[e^{i\psi} \frac{f(\lambda)}{f(0)} \right], \quad (2.23)$$

donde

$$f = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\lambda z} D(z) dz \quad (2.24)$$

es la transformada de Fourier de $D(z)$ respecto de λ . De esta manera, teniendo en cuenta que de la ec. (2.23) se tiene $I = \cos \psi |f(\lambda)|/f(0)$, el efecto de decaimiento es multiplicar la amplitud de las oscilaciones cuánticas por el factor de reducción $R = |f(\lambda)|/f(0)$.

A pesar de que este método parece justificar sencillamente cómo aparecen los factores de reducción en las OM con decaimiento, falta aún considerar cómo es la función de distribución

2. Métodos teóricos

$D(z)$ y el parámetro de escala λ . Esto debe hacerse infiriendo $D(z)$ de acuerdo al efecto de decaimiento considerado. Por ejemplo, para la temperatura sabemos que la probabilidad de ocupación de un estado de energía ε está dado por la función de Fermi-Dirac^[154] $f(\varepsilon) = [1 + e^{\beta(\varepsilon-\mu)}]^{-1}$. De aquí surge que la función de distribución, para el efecto de la temperatura, es $-df(\mu)/d\mu$.

Una justificación más formal de los efectos de decaimiento como factores de reducción en las oscilaciones cuánticas, surge de considerar el gran potencial en el caso general, dado por la ec. (2.8). A $T = 0$ se tiene (absorbiendo la degeneración D en la DOS ρ)

$$\Omega(T = 0, \mu) = \int_{-\infty}^{\mu} \rho(\varepsilon) (\varepsilon - \mu) d\varepsilon, \quad (2.25)$$

de donde diferenciando dos veces resulta $\rho(\mu) = -\partial^2 \Omega(T = 0, \mu) / \partial^2 \mu$. Usando esto, integrando por partes puede demostrarse que la ec. (2.8) se puede reescribir como^[83]

$$\Omega(T, \mu) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial f(\mu - \varepsilon)}{\partial \varepsilon} \Omega(0, \varepsilon) d\varepsilon, \quad (2.26)$$

donde f es la función de Fermi Dirac. De esta manera se ve que el efecto de la temperatura aparece como una convolución entre la función distribución $-df/d\mu$ y el gran potencial a $T = 0$, lo cual, al expresar la parte oscilante de Ω como en la ec. (1.2), da como resultado un factor de reducción. Esto justifica de alguna manera el PS introducido por Shoenberg con la ec. (2.22). Vale destacar que la convolución para obtener $\Omega(T, \mu)$ puede extenderse a $\Omega(0, \varepsilon)$, para obtener el efecto de decaimiento debido a las impurezas (lo cual viene dado por cómo es la DOS ρ). Es decir, $\Omega(0, \varepsilon)$ puede expresarse como una convolución entre el gran potencial en el estado fundamental, con la función distribución asociada a ρ . Así se obtiene el factor de reducción $R_{\Gamma}(p)$ debido a las impurezas.

2.2. Segunda cuantización

En la concepción original de la mecánica cuántica se encontró que las partículas se comportan, en ciertos aspectos, como ondas. Por razones históricas, esta propiedad se conoce como *primera cuantización*. Más adelante se descubrió que, de hecho, lo que se pensaba que eran ondas se comportaba, en ciertos aspectos, como partículas. El ejemplo prominente de esto es la radiación electromagnética, cuyo comportamiento en el régimen cuántico se puede explicar por medio de partículas conocidas como *fotones*. El concepto de que las ondas se comportan como partículas se conoce como *segunda cuantización*. En términos generales la noción de segunda cuantización alude a considerar las partículas como excitaciones de las funciones de onda cuánticas.

2. Métodos teóricos

2.2.1. Representación de ocupación de números

La idea básica de la segunda cuantización surge del tratamiento del oscilador armónico cuántico en función de los operadores escalera (*ladder operators*). En una dimensión, un oscilador armónico cuántico con Hamiltoniano $H = p^2/2m + m\omega^2 x^2/2$ (donde ω es la frecuencia de oscilación) puede describirse en función de los operadores a^\dagger y a como^[76]

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right). \quad (2.27)$$

Las expresiones de a^\dagger y a , en función de los operadores x y p , son^[161]

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{i}{m\omega} p \right) \quad (2.28)$$

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{i}{m\omega} p \right). \quad (2.29)$$

De esta manera se demuestra que los autoestados del oscilador armónico $|n\rangle$, tales que $H|n\rangle = \hbar\omega(n + 1/2)|n\rangle$, satisfacen

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (2.30)$$

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (2.31)$$

$$a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle, \quad (2.32)$$

donde n es un entero positivo. Notar que si el estado fundamental del sistema es $|0\rangle$, tal que $H|0\rangle = \hbar\omega/2|0\rangle$, entonces $a^\dagger|0\rangle = |1\rangle$. Así, cualquier autoestado $|n\rangle$ puede obtenerse al ir aplicando a^\dagger sucesivamente sobre $|0\rangle$, esto es

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle, \quad (2.33)$$

donde el factor $\sqrt{n!}$ surge de normalizar los autoestados. Este procedimiento sugiere que los operadores a^\dagger y a pueden interpretarse como operadores de creación y destrucción, respectivamente. Es decir, el operador a^\dagger crea un cuanto de energía $\hbar\omega$ y mueve el oscilador al siguiente autoestado; el operador a destruye un cuanto de energía $\hbar\omega$ y baja el oscilador al anterior autoestado. Lo crucial aquí es que estos cuantos de energía se comportan como partículas, de forma tal que puede pensarse al proceso como adición o sustracción de partículas al sistema.

En la segunda cuantización lo que se hace es, básicamente, generalizar a cualquier sistema el formalismo de los operadores a^\dagger y a en el oscilador armónico cuántico. Esto conlleva describir un sistema de muchas partículas indistinguibles en función de operadores que crean

2. Métodos teóricos

y destruyen las partículas. Suponer entonces un sistema de muchas partículas, con estados disponibles $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots$. Suponemos que el sistema está ocupado de forma tal n_k partículas ocupan el estado ε_k , con $k = 1, 2, \dots$. Como las partículas son indistinguibles, solo nos interesa cuántas ocupan cada estado. Esto da lugar a lo que se conoce como *representación de ocupación de número*, donde el sistema se representa como $|n_1, n_2, \dots\rangle$. El ingrediente fundamental de la segunda cuantización es que la física se representa con los operadores y no con los estados (kets) cuánticos. Recordar que para un oscilador cuántico, cualquier autoestado puede obtenerse partiendo del estado fundamental $|0\rangle$ y aplicando a^\dagger . Generalizando esta idea, el estado $|n_1, n_2, \dots\rangle$ se describe como

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \prod_k \frac{(a_k^\dagger)^{n_k}}{\sqrt{n_k!}} |0\rangle. \quad (2.34)$$

Aquí, el estado $|0\rangle$ se piensa como el estado vacío del sistema, es decir, sin partículas. Para que la formulación sea consistente, los operadores de creación y destrucción deben cumplir con la indistinguibilidad de las partículas, y las condiciones de simetría ante el intercambio de las mismas. Esto implica que, por ejemplo, un estado $|1, 1\rangle$ puede obtenerse al aplicar sobre $|0\rangle$ primero a_1^\dagger y después a_2^\dagger , o viceversa. En ambos casos se obtiene el mismo estado final $|1, 1\rangle$, por lo que

$$a_1^\dagger a_2^\dagger = \lambda a_2^\dagger a_1^\dagger, \quad (2.35)$$

donde λ es una constante. Existen dos posibilidadesⁱ $\lambda = \pm 1$, correspondiendo a los casos en que la función de onda es simétrica (+1) o antisimétrica (-1) ante el cambio de partículas. Las partículas correspondientes son los bosones y los fermiones. Dependiendo del caso cambian las relaciones de conmutación entre los operadores de creación y destrucción. Para los bosones ($\lambda = 1$), se tiene $a_1^\dagger a_2^\dagger = a_2^\dagger a_1^\dagger$ y en general $[a_i, a_j^\dagger] \equiv a_i a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i = \delta_{ij}$. Esto implica que no hay límite en la cantidad de partículas que pueden ocupar cada estado cuántico^[161]. En cambio, para los fermiones ($\lambda = -1$), se tiene $a_1^\dagger a_2^\dagger = -a_2^\dagger a_1^\dagger$ y en general $\{a_i, a_j^\dagger\} \equiv a_i a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i = \delta_{ij}$, es decir los operadores anticonmutan. Esto implica que los fermiones satisfacen el principio de exclusión de Pauli, tal que cada estado cuántico puede estar desocupado o ocupado con un único fermion. Vale destacar que, al igual que en el oscilador cuántico, existe el operador de número $n_k = a_k^\dagger a_k$, tal que $n_k |n_1, n_2, \dots\rangle = N_k |n_1, n_2, \dots\rangle$, donde N_k son la cantidad de partículas en el estado cuántico ε_k . Luego, para bosones $N_k \geq 0$ no tiene límite, mientras que para fermiones $N_k = 0, 1$.

El formalismo de la segunda cuantización se aplica no solo en la representación de los estados cuánticos, sino también se extiende a la representación de cualquier operador. Para

ⁱEn sistemas bidimensionales uno puede considerar $\lambda \neq \pm 1$. Las partículas resultantes tiene una estadística fraccionaria y se conocen como *anyones*.

2. Métodos teóricos

operadores de una partícula, digamos en general \hat{A} , su representación es^[161]

$$\hat{A} = \sum_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}, \quad (2.36)$$

donde $A_{\alpha\beta} = \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle$, siendo $|\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$ estados de partícula simple, que satisfacen las relaciones de clausura $1 = \sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha|$ y $1 = \sum_{\beta} |\beta\rangle \langle \beta|$. Físicamente, el operador \hat{A} en segunda cuantización puede interpretarse como la destrucción de una partícula con a_{β} , la multiplicación con el elemento de matriz $A_{\alpha\beta}$, y la posterior creación de una partícula con a_{α}^{\dagger} , sumando sobre todos los estados del sistema. Un ejemplo de esta representación es el operador de número $\hat{n} = \sum_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}$. Otro ejemplo es el Hamiltoniano de una partícula libre $H = p^2/2m$, que en segunda cuantización toma la forma $\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} (p^2/2m) \hat{n}_{\mathbf{p}}$, donde $\hat{n}_{\mathbf{p}} = a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}}$.

De manera similar se pueden describir los operadores de dos partículas, los cuales surgen al considerar las interacciones en el sistema. En segunda cuantización, un operador \hat{A} de dos partículas toma la forma^[161]

$$\hat{A} = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} A_{\alpha\beta\gamma\delta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\gamma} a_{\delta}, \quad (2.37)$$

donde $A_{\alpha\beta\gamma\delta} = \langle \alpha, \beta | \hat{A} | \gamma, \delta \rangle$. Nuevamente podemos hacer la misma interpretación física que antes. Es decir, el operador de dos partículas en segunda cuantización involucra todos los procesos que destruyen dos partículas (a_{γ} y a_{δ}), multiplicación con los elementos de matriz $A_{\alpha\beta\gamma\delta}$, y la creación de dos partículas (a_{α}^{\dagger} y a_{β}^{\dagger}). Un ejemplo de esta representación es el operador de interacción electrónica entre dos partículas, que en segunda cuantización adquiere la forma, en el espacio de momentos,

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \mathbf{q}} \tilde{V}_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}_2 - \mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_1}, \quad (2.38)$$

donde $\tilde{V}_{\mathbf{q}}$ es la transformada de Fourier del potencial Coulombiano entre dos partículas. La expresión de \hat{V} en segunda cuantización da lugar a la interpretación de la interacción entre dos partículas a través de partículas que *llevan* la fuerza. Es decir, podemos pensar a \hat{V} como un proceso de *scattering* donde una partícula inicial con momento \mathbf{p}_2 envía una partícula de fuerza con momento \mathbf{q} , reduciendo su momento a $\mathbf{p}_2 - \mathbf{q}$. La partícula que lleva la fuerza es adsorbida por otra partícula que venía con momento \mathbf{p}_1 , aumentando su momento final a $\mathbf{p}_1 + \mathbf{q}$. El proceso puede representarse mediante diagramas de Feynman.

2.2.2. Modelo de *Tight Binding*

El método de Enlace Fuerte (*Tight Binding*: TB) es un modelo semi-empírico para calcular las propiedades electrónicas en sólidos cristalinos^[162]. Es aplicable a situaciones en las cuales las funciones de ondas de los electrones se encuentran fuertemente ligadas a los sitios atómicos de la red cristalina (de ahí su nombre). Representa, por lo tanto, el polo opuesto del modelo de electrones casi-libres (*near free electron model*), aplicable sobre todos a los metales de los grupos I-IV de la tabla periódica^[163]. En el modelo de TB, en cambio, los centros de red representan una fuerte perturbación al movimiento de los electrones en el sistema. Ejemplos de estos sistemas son precisamente los materiales basados en carbono, como el grafito o el grafeno. También los materiales 2D tales como el siliceno o el germaneno. De hecho, la razón de que se formen estos sistemas 2D radica justamente en los fuertes enlaces entre sus átomos.

Desde el punto de vista teórico, la fuerte ligadura de los electrones a los sitios de la red sugiere que es conveniente expandir el Hamiltoniano del sistema en función de los orbitales atómicos de los iones aislados. Esta representación da lugar a lo que se conocen como estados de Wannier, que básicamente pueden pensarse como los correspondientes orbitales locales en una red cristalina. En otras palabras, los estados de Wannier son funciones de ondas electrónicas localizadas alrededor de los sitios de red. Su definición es a partir de los estados de Bloch, que en una banda electrónica son funciones de onda^[162]

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u(\mathbf{r}), \quad (2.39)$$

donde $u(\mathbf{r})$ es una función periódica con la periodicidad de la red, i.e. $u(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r} + \mathbf{R})$, donde \mathbf{R} es un vector de red. En función de los estados de Bloch, se definen los estados de Wannier como^[164]

$$\phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}}^{1\text{ZB}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.40)$$

donde N son la cantidad de celdas primitivas en el sólido y 1ZB es la primera zona de Brillouin. Notar que mientras los estados de Bloch dependen del vector de onda \mathbf{k} , los estados de Wannier dependen del vector de red \mathbf{R} . Es importante recalcar que a pesar de que los estados de Bloch son autoestados del Hamiltoniano del sólido cristalino, en general los estados de Wannier no lo son.

Usando el formalismo de la segunda cuantización, es posible utilizar los estados de Wannier para construir el modelo de TB. El punto de partida es que los estados de Wannier forman una base ortonormal, como puede verificarse de la definición (2.40). Esto implica que, en notación de Dirac, satisfacen $|\mathbf{r}\rangle = \sum_{\mathbf{R}} |\phi_{\mathbf{R}}\rangle \langle \phi_{\mathbf{R}} | \mathbf{r}\rangle$, donde $|\mathbf{r}\rangle$ son los estados del

2. Métodos teóricos

espacio real. Luego podemos decir que los estados de Wannier inducen la transformaciónⁱ

$$a^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_i \phi_{\mathbf{R}_i}^*(\mathbf{r}) a_i^\dagger, \quad (2.41)$$

donde, siguiendo la notación usual, denotamos la sumatoria sobre \mathbf{R} como una sumatoria sobre los sitios $i = 1, 2, \dots, N$ de la red. En la ecuación anterior, el operador $a^\dagger(\mathbf{r})$ crea un electrón en \mathbf{r} , mientras que el operador a_i^\dagger crea un electrón en un sitio \mathbf{R}_i de la red. De manera similar, teniendo en cuenta la ec. (2.40) tenemos

$$a_{\mathbf{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} a_i^\dagger \quad (2.42)$$

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} a_{\mathbf{k}}^\dagger. \quad (2.43)$$

Ahora bien, sabiendo que los estados de Bloch son autoestados y por lo tanto diagonalizan el Hamiltoniano cristalino, en segunda cuantización se tiene que $H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}$, donde $\epsilon_{\mathbf{k}}$ son las energías de los electrones en el sólido (teniendo en cuenta el potencial cristalino). Luego, usando la ec. (2.42) obtenemos $H = N^{-1} \sum_{ii'} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_{i'})} \epsilon_{\mathbf{k}} a_i^\dagger a_{i'}$, por lo que el Hamiltoniano de TB queda

$$H = \sum_{ii'} t_{ii'} a_i^\dagger a_{i'}, \quad (2.44)$$

donde definimos $t_{ii'} = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_{i'})} \epsilon_{\mathbf{k}}$. Esta representación de H describe a los electrones como ligados a los sitios de red i , a través de los operadores de creación y destrucción a_i^\dagger y a_i . El parámetro $t_{ii'}$ mide la fuerza de la interacción entre los sitios, y usualmente se lo conoce como integral de solapamiento (*hopping*). En efecto, de acuerdo a su definición, los elementos de $t_{ii'}$ dependen del solapamiento entre los orbitales atómicos en cada sitio de la red. En el caso atómico extremo, no hay solapamiento entre orbitales y los niveles de energía $\epsilon_{\mathbf{k}}$ son constantes y degenerados, por lo que $t_{ii'} = \delta_{ii'}$: no hay intercambio posible entre distintos sitios de la red.

El modelo de TB dado por la ec. (2.44) es útil en el caso usual de que solo las interacciones a primeros vecinos son apreciables. Esto corresponde a estados fuertemente ligados, donde el solapamiento entre distintos orbitales es débil. Más aún, en sólidos cristalinos uniformes se pueden considerar $t_{ii'} = -t$ a primeros vecinos (y $t_{ii'} = 0$ de otra manera), de forma que el Hamiltoniano de TB toma la forma simple

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} a_i^\dagger a_j, \quad (2.45)$$

ⁱEn lo que sigue, para simplificar obviaremos el espín de los electrones. De todos modos su inclusión es trivial.

2. Métodos teóricos

donde $\langle ij \rangle$ indica sumatoria solo a primeros vecinos. Este modelo de TB será la base con la cual se calculan las propiedades electrónicas en los materiales 2D a energías cercanas al nivel de Fermi. Vale destacar que el valor de t depende del cálculo detallado de cómo y cuáles son los orbitales que se solapan en la red cristalina, lo que a su vez depende de qué átomos está compuesto el material. En los materiales 2D, valores típicos de t se encuentran en el rango $1 \sim 3$ eV^[7,50].

2.2.3. Modelo de Hubbard

El modelo de Hubbard es la extensión más simple del modelo de TB, considerando las interacciones entre electrones. Estas interacciones pueden tener importantes consecuencias y alterar de manera significativa las propiedades de los materiales (por ejemplo, las masas efectivas o la velocidad de Fermi). El punto de partida es la expresión de las interacciones entre electrones en segunda cuantización [ec. (2.38)]. Teniendo en cuenta el espín σ de los electrones, en el espacio de sitios de red la interacción entre electrones adopta la forma $\hat{V} = \sum_{ii'jj'} U_{ii'jj'} a_{i\sigma}^\dagger a_{i'\sigma'}^\dagger a_{j\sigma} a_{j'\sigma'}$, donde^[164]

$$U_{ii'jj'} = \frac{1}{2} \int \int \phi_{\mathbf{R}_i}^*(\mathbf{r}) \phi_{\mathbf{R}_j}(\mathbf{r}) V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi_{\mathbf{R}_{i'}}^*(\mathbf{r}') \phi_{\mathbf{R}_{j'}}(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (2.46)$$

En principio, considerando \hat{V} y el Hamiltoniano cristalino, uno podría resolver la física del problema. Sin embargo, esto no es posible debido a la complejidad de \hat{V} , por lo que se suelen hacer algunas aproximaciones. La situación más simple se da en el régimen atómico, donde el solapamiento entre orbitales vecinos es débil y el modelo de TB es buena aproximación. En tal caso podemos tomar solo la interacción Coulombiana en cada sitio, de forma que solo $U_{iiii} = U/2$ es no nulo, y entonces $\hat{V} = \sum_{i\sigma\sigma'} U_{iiii} a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma'}^\dagger a_{i\sigma} a_{i\sigma'} = \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$, donde $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$ es el operador de número. De esta manera, considerando solo interacción a primeros vecinos, se obtiene el modelo de Hubbard^[161]

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} a_i^\dagger a_j + U \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (2.47)$$

Físicamente, este Hamiltoniano representa la interacción a primeros vecinos entre electrones, con la condición de que la doble ocupación en un sitio de la red es penalizada por la interacción Coulombiana entre electrones. Es decir, la interacción entre electrones se asume que es significativa solo cuando ocupan el mismo sitio de la red. Por esta razón, el modelo de Hubbar representa lo que se conoce como correlaciones a corto alcance. Notar que, siguiendo el principio de Pauli, solo dos electrones de distinto espín pueden ocupar el mismo sitio.

2.3. Modelo de Anderson

El modelo de Anderson pretende describir la formación de momentos magnéticos locales en una impureza magnética adsorbida en un material no magnético. Para esto toma en cuenta el modelo de Hubbard para la interacción electrónica, junto con la interacción de TB a primeros vecinos, considerando a su vez la hibridización de la impureza adsorbida con la red cristalina. De esta manera, Anderson propone el Hamiltoniano^[118]

$$H = H_{0f} + H_{0d} + H_{corr} + H_{sd}. \quad (2.48)$$

Aquí, H_{0f} es la energía sin perturbar de los electrones libres en el metal, cuya expresión es

$$H_{0f} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (2.49)$$

donde $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ es la energía de los electrones con momento \mathbf{k} , $\sigma = \pm 1$ indica el espín del electrón, mientras que $c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ y $c_{\mathbf{k},\sigma}$ son los operadores de creación y destrucción^[164]; el operador de número es $n_{\mathbf{k},\sigma} = c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma}$. En los metales, los electrones libres descritos por H_{0f} consisten usualmente de los electrones s y p de las capas libres, aunque en algunos casos (por ejemplo Sc), los electrones libres pueden extenderse a la capa d ^[165].

El segundo término H_{0d} es la energía sin perturbar de los estados d en la impureza. Anderson considera a estos estados en la impureza como no degenerados, aunque como él mismo recalca, el modelo se puede fácilmente extender a varios niveles en las capas d o f . Teniendo en cuenta entonces un solo nivel de energía en la impureza, resulta

$$H_{0d} = E \sum_{\sigma} c_{d,\sigma}^\dagger c_{d,\sigma}, \quad (2.50)$$

donde E es la energía en la impureza, $c_{d,\sigma}^\dagger$ y $c_{d,\sigma}$ los operadores de creación y destrucción, siendo $n_{d,\sigma} = c_{d,\sigma}^\dagger c_{d,\sigma}$ el operador número de electrones con espín σ en la impureza. El tercer término H_{corr} es la energía de repulsión de los electrones en la capa d de la impureza, es decir,

$$H_{corr} = U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}, \quad (2.51)$$

donde^[117]

$$U = \int \int |\phi_d(\mathbf{r}_1)|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\phi_d(\mathbf{r}_2)|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (2.52)$$

Vale destacar que el modelo solo considera la interacción electrónica para los electrones d dentro del impureza. Es decir, no se considera la interacción $e - e$ para los electrones libres. Esto es razonable puesto que los electrones libres están mucho más extendidos que los electrones en la impurezas, y por tanto tienen un mayor *screening* que en el átomo.

2. Métodos teóricos

Finalmente el último término en el Hamiltoniano de Anderson tiene en cuenta la interacción $s - d$ de los electrones libres con la impureza. La expresión general es

$$H_{sd} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} V_{d\mathbf{k}} \left(c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{d, \sigma} + c_{d, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} \right), \quad (2.53)$$

donde $V_{d\mathbf{k}}$ es la matriz que indica cómo es la hibridización en la impureza. El valor de $V_{d\mathbf{k}}$ depende del sistema en particular, en relación a cómo es la impureza (átomo adsorbido), dónde está adsorbida (qué tipo de sitio), y cuál es el metal no magnético.

2.3.1. Función de Green y método autoconsistente

La solución total del problema, para el Hamiltoniano dado por la ec. (2.48), consiste en encontrar los autovectores y autovalores. Esto solo puede hacerse, en general, usando métodos perturbativos^[166]. Sin embargo, en el estudio de la formación de momentos magnéticos locales, solo interesa encontrar promedios relacionados con las energías del problema. Así, la propiedad relevante a calcular es la densidad de estados (DOS) $\rho_{d\sigma}$ con espín σ en la impureza, puesto que ésta determina su ocupación y por tanto cuándo se produce momento magnético. En el estado fundamental, la DOS $\rho_{d\sigma}$ determina el número de ocupación $\langle n_{d, \sigma} \rangle$ en la impureza

$$\langle n_{d, \sigma} \rangle = \int_{-\infty}^{\mu} \rho_{d\sigma}(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (2.54)$$

donde μ es el potencial químico (energía de Fermi) del sistema. Así, existe formación de momento magnético solo si $\langle n_{d, \uparrow} \rangle \neq \langle n_{d, \downarrow} \rangle$. La densidad de estados puede calcularse utilizando la función de Green, formalmente definida como

$$G = \frac{1}{\varepsilon + is - H}. \quad (2.55)$$

De aquí, la DOS $\rho_{d\sigma}$ puede obtenerse tomando la parte imaginaria de las componentes de G en la impureza^[167]

$$\rho_{d\sigma}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [G_{dd}^\sigma(\varepsilon)]_{s \rightarrow 0}, \quad (2.56)$$

donde $G_{dd}^\sigma(\varepsilon) = \langle d, \sigma | G | d, \sigma \rangle$, siendo $|d, \sigma\rangle$ los autoestados en la impureza con espín σ . Para obtener G_{dd}^σ de manera analítica, se suele utilizar la aproximación de campo medio en el término de Hubbard dado por H_{corr} [ec. (2.51)]. Esto implica considerar^[168]

$$U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \simeq \sum_{\sigma} U \langle n_{d, -\sigma} \rangle n_{d, \sigma} - U \langle n_{d, \uparrow} \rangle \langle n_{d, \downarrow} \rangle. \quad (2.57)$$

2. Métodos teóricos

De esta manera se demuestra que, al encontrar la función de G invirtiendo H y proyectando sobre la impureza, G_{dd}^σ puede escribirse como^[118,169]

$$G_{dd}^\sigma(\varepsilon) = \frac{1}{z - E_\sigma - \Sigma_\sigma}, \quad (2.58)$$

donde $z = \varepsilon + is$, $E_\sigma = E + U \langle n_{d,-\sigma} \rangle$ es la energía en la impureza más la correlación electrónica, y Σ_σ es la autoenergía para el espín σ . Esta autoenergía proviene de la hibridización de los electrones libres con la impureza, lo cual es tenido en cuenta por medio de H_{sd} [ec. (2.53)]. La parte real de Σ_σ determina el residuo $Z_\sigma^{-1} = 1 - \text{Re}\Sigma_\sigma/\varepsilon$ (que a su vez determina el *shift* en la energía E_σ). La parte imaginaria de Σ_σ determina el ensanchamiento (*broadening*) de la DOS en la impureza. Así, la ec. (2.56) queda

$$\rho_{d\sigma}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \frac{\text{Im}\Sigma_\sigma}{(Z^{-1}\varepsilon - E_\sigma)^2 + (\text{Im}\Sigma_\sigma)^2}. \quad (2.59)$$

Las expresiones de $\text{Im}\Sigma_\sigma$ y Z^{-1} dependen, naturalmente, de cómo es el sistema en cuestión.

Finalmente, para estudiar la formación de momentos magnéticos, debemos integrar la ec. (2.54) para encontrar $\langle n_{d,\sigma} \rangle$, y de aquí determinar cuándo $\langle n_{d,\uparrow} \rangle \neq \langle n_{d,\downarrow} \rangle$. Ahora bien, puesto que en la DOS $\rho_{d\sigma}$ dada por la ec. (2.59), la energía $E_\sigma = E + U \langle n_{d,-\sigma} \rangle$ depende de la ocupación del espín opuesto $\langle n_{d,-\sigma} \rangle$, la obtención de $\langle n_{d,\sigma} \rangle$ solo puede realizarse de manera autoconsistente. Es decir, empezando desde una ocupación de prueba para las ocupaciones $\langle n_{d,\sigma} \rangle$, se calcula $\rho_{d\sigma}$ por medio de la ec. (2.56), y con está se integra la ec. (2.54) para obtener los nuevos $\langle n_{d,\sigma} \rangle$; el proceso se repite hasta obtener convergencia.

Capítulo 3

Propiedades electrónicas de los materiales 2D

Debido a su naturaleza bidimensional, los materiales 2D poseen propiedades únicas, no presentes en sistemas 3D. Por ejemplo, el grafeno es unas 200 veces más fuerte que el acero, y posee una gran conductividad eléctrica y térmica. Dichas cualidades están relacionadas con las propiedades electrónicas a bajas energías, cerca del nivel de Fermi: los electrones se comportan como fermiones relativistas. Así, los materiales 2D resultan un sistema accesible experimentalmente para estudiar fenómenos relativistas.

En este capítulo se describen las propiedades electrónicas de los materiales 2D utilizando el modelo de *Tight Binding* (TB). Se demuestra que, a bajas energía, se obtiene un Hamiltoniano efectivo del sistema análogo a la ecuación de Dirac. A partir de esto se considera el efecto de un campo magnético en el sistema y se calculan los niveles de Landau, los cuales serán la base para la descripción de las oscilaciones magnéticas en los capítulos siguientes.

3.1. Grafeno

El grafeno es un material bidimensional, formado por átomos de carbono dispuestos en cada vértice de una red hexagonal^[2,3]. Representa la estructura básica de otros materiales tales como el grafito^[36] o los nanotubos de carbono^[37]. Desde la obtención experimental de grafeno en 2004, por los científicos rusos Andre Geim y Konstantin Novoselov^[1], el grafeno ha ganado mucha atención debido a sus increíbles propiedades. Entre éstas destacan su increíble resistencia^[22,23] y gran conductividad térmica^[24,25] y eléctrica^[25,29]. Desde el punto de vista de la física fundamental, el grafeno es un material único ya que permite estudiar fenómenos mecánico-cuánticos relativistas^[14,15], muchos de los cuales son inobservables en la física de altas energías.

3. Propiedades electrónicas de los materiales 2D

3.1.1. Propiedades básicas del carbono

La estructura electrónica del grafeno se debe, en gran medida, a las propiedades del carbono que lo constituye. Este elemento químico, la base de la química orgánica, posee 6 electrones, de los cuales 4 son de valencia. Su estructura electrónica es $1s^2 2s^2 2p^2$ y son los electrones de valencia quienes forman los enlaces covalentes, cuyos arreglos dan lugar a las diferentes estructuras cristalinas (formas alotrópicas) del carbono, tales como el grafito^[36], el diamante^[170] o el grafeno^[3]. La formación de estas diferentes estructuras cristalinas está determinado por cómo son los enlaces entre los átomos de carbono. Dichos enlaces surgen de la hibridación entre los orbitales s y p , dando lugar a orbitales sp . En la Fig. 3.1 se muestran los diferentes tipos de hibridación.

En la hibridación sp^3 , los orbitales $2s, 2p_x, 2p_y$ y $2p_z$ se mezclan para formar cuatro orbitales híbridos. En el espacio real estos orbitales forman un tetraedro, de forma que cada átomo de C está enlazado con otros 4 átomos de C por medio de enlaces σ . Esta hibridación es la base de la estructura del diamante. Por otro lado, en la hibridación sp^2 los orbitales $2s, 2p_x$ y $2p_y$ se mezclan para formar tres orbitales híbridos. Estos orbitales se encuentran en un plano, dispuestos de forma trigonal, formando un ángulo de 120° entre sí. Los tres orbitales híbridos forman enlaces σ en el plano, mientras que el orbital restante $2p_z$ forma enlaces π perpendiculares el plano. La hibridación sp^2 es la base de la estructura de los planos de grafito, es decir, del grafeno. La última hibridación posible es la sp , en la que los orbitales $2s$ y $2p_x$ se mezclan para formar dos orbitales híbridos, localizados en una misma línea, formando un ángulo de 180° entre sí. Los orbitales restantes $2p_y$ y $2p_z$ forman dos

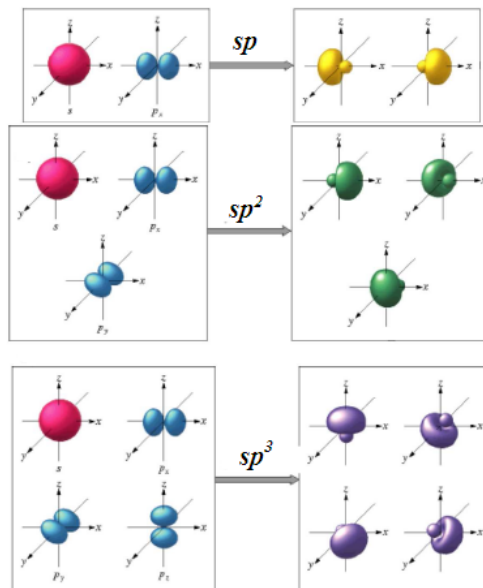


Figura 3.1: Diferentes hibridaciones entre los orbitales s y p del carbono.

3. Propiedades electrónicas de los materiales 2D

orbitales deslocalizados π . Esta situación da lugar a moléculas lineales, como por ejemplo CO_2 .

A partir del carbono también se derivan otras estructuras. Una de las más interesantes son los nanotubos de carbono: una lámina de grafeno enrollada sobre sí misma formando un cilindro^[171]. En general, en función del enrollamiento, los nanotubos se clasifican en dos grupos: metálicos y semiconductores^[40,41]. En teoría, los nanotubos metálicos pueden soportar corrientes eléctricas muy superiores a las soportadas por metales como el cobre o la plata, haciéndolos un material muy interesante desde el punto de vista tecnológico^[172,173].

Resulta interesante notar que el grafeno, a pesar de ser la configuración más simple entre todas las posibles configuraciones del carbono, fue la última en obtenerse experimentalmente. La razón fundamental era que simplemente no se creía que pudiese existir como una estructura bidimensional. El argumento físico detrás de esta creencia lo habían provisto Landau^[20] y Peierls^[21], quienes argumentaron que en un cristal bidimensional el valor medio de las fluctuaciones térmicas de los fonones escala logarítmicamente con el tamaño de la muestra, divergiendo en el límite termodinámico. Esto implicaría que el cristal bidimensional se desintegraría. Posteriormente, Mermin extendería este resultado a sistemas bidimensionales más generales, estableciendo que no existe orden de largo alcance en dos dimensiones, aunque solo para potenciales tipo Lennard-Jones^[174]. Sin embargo, luego se demostró teóricamente que aún en ausencia de orden de largo alcance, un cristal 2D puede mostrar propiedades físicas asociadas a fases ordenadas^[175]. Esto conlleva a que el cristal no se encuentre en una situación completamente plana, apareciendo corrugaciones y defectos como se observa experimentalmente^[176].

3.1.2. Estructura geométrica

En la red hexagonal del grafeno, cada átomo de carbono está enlazado con otros tres átomos mediante tres enlaces covalentes σ . La hibridización de estos orbitales del C, para estos enlaces σ , es entonces del tipo sp^2 . El restante orbital $2p_z$ forma los enlaces π ^[177]. Desde el punto de vista electrónico, estos orbitales π son los responsables de las propiedades de transporte del grafeno^[31,62].

En la Fig. 3.2 se muestra esquemáticamente la red hexagonal del grafeno. La celda primitiva contiene una base de dos átomos, los cuales a su vez definen las subredes A y B . Como se indica en la figura, para los ejes elegidos los vectores primitivos son $\mathbf{a}_1 = d(3\mathbf{e}_x + \sqrt{3}\mathbf{e}_y)/2$ y $\mathbf{a}_2 = d(3\mathbf{e}_x - \sqrt{3}\mathbf{e}_y)/2$, donde $d = 1,42 \text{ \AA}$ es la distancia entre los átomos de C en la red^[16]. Las posiciones de los átomos A y B , en la celda primitiva, son $\mathbf{d}_1 = (d/2)\mathbf{e}_x$ y $\mathbf{d}_2 = -(d/2)\mathbf{e}_x$ respectivamente. Cada átomo en la red tiene tres primeros vecinos, los cuales forman los enlaces σ en el plano. Para un átomo A , los primeros tres vecinos B están en posiciones $\mathbf{n}_1 = d\mathbf{e}_x$, $\mathbf{n}_2 = d(-\mathbf{e}_x + \sqrt{3}\mathbf{e}_y)/2$ y $\mathbf{n}_3 = -d(\mathbf{e}_x + \sqrt{3}\mathbf{e}_y)/2$.

3. Propiedades electrónicas de los materiales 2D

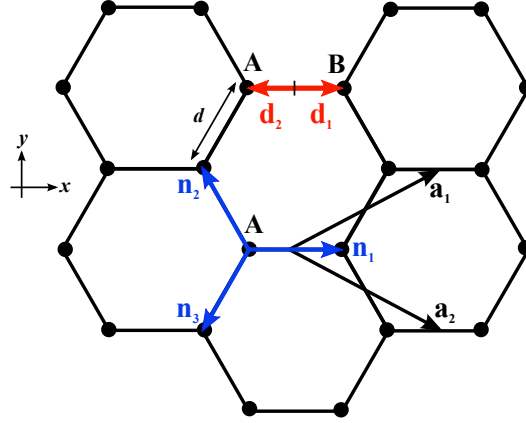


Figura 3.2: Red hexagonal del grafeno. \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 son los vectores de red, \mathbf{d}_1 y \mathbf{d}_2 los vectores para la base de las subredes A y B , y \mathbf{n}_1 , \mathbf{n}_2 y \mathbf{n}_3 son los vectores a primeros vecinos para un sitio A .

3.1.3. Modelo de *Tight Binding*

Las propiedades electrónicas en grafeno se pueden describir con un modelo de *Tight Binding* (TB) (sección 2.2.2). Considerando solo interacciones a primeros vecinos para los electrones deslocalizados π , de los cuales dependen las propiedades de transporte en grafeno, el Hamiltoniano de TB esⁱ [16]

$$H_0 = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \left(a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i \right), \quad (3.1)$$

donde $a_{i,\sigma}^\dagger$ ($a_{i,\sigma}$) crea (aniquila) un electrón en un sitio r_i en la subred A , mientras que $b_{i,\sigma}^\dagger$ ($b_{i,\sigma}$) crea (aniquila) un electrón en un sitio r_i en la subred B . El parámetro $t \simeq 2,8$ eV es la integral de solapamiento a primeros vecinos^[16]. La sumatoria $\langle i,j \rangle$ indica que es solo a primeros vecinos. El Hamiltoniano H_0 , escrito en el espacio real, no es diagonal. Para diagonalizarlo se lleva al espacio de momento considerando la transformada de Fourier de los operadores de creación y destrucción, dadas por $a_i = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_{\mathbf{k}} / \sqrt{N}$ y $b_i = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} b_{\mathbf{k}} / \sqrt{N}$, donde N es el número de celdas primitivas en la red de grafeno. Remplazando en H_0 se obtiene

$$H_0 = -t \sum_{\mathbf{k}} \left[\phi(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \phi^*(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \right], \quad (3.2)$$

donde $\phi(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}_i}$, siendo \mathbf{n}_i las distancias a primeros vecinos en la red de grafeno (ver Fig. 3.2). Este Hamiltoniano se puede diagonalizar considerando los siguientes operadores

$$c_{\mathbf{k},\lambda} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(b_{\mathbf{k}} + \lambda \frac{\phi_{\mathbf{k}}^*}{|\phi_{\mathbf{k}}|} a_{\mathbf{k}} \right), \quad (3.3)$$

ⁱEn lo que sigue obviaremos el espín de los electrones, el cual será tenido en cuenta en el modelo de TB en el capítulo 6, al estudiar la formación de momentos magnéticos locales.

3. Propiedades electrónicas de los materiales 2D

donde $\lambda = \pm 1$. Escrito en esta base resulta

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} t |\phi(\mathbf{k})| \left(c_{\mathbf{k},+}^\dagger c_{\mathbf{k},+} - c_{\mathbf{k},-}^\dagger c_{\mathbf{k},-} \right). \quad (3.4)$$

Por lo tanto la relación de dispersión en grafeno, a primeros vecinos, es $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \pm t |\phi(\mathbf{k})|$. Las dos energías dan lugar a la banda de valencia ($\varepsilon_{\mathbf{k}} = -t |\phi(\mathbf{k})|$) y la banda de conducción ($\varepsilon_{\mathbf{k}} = +t |\phi(\mathbf{k})|$). La función $\phi(\mathbf{k})$ se puede escribir en términos de los vectores de red \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 , considerando que $\phi(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}_i} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}_1} (1 + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2})$. De esta manera se obtiene

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + 2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + 2 \cos[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)]}. \quad (3.5)$$

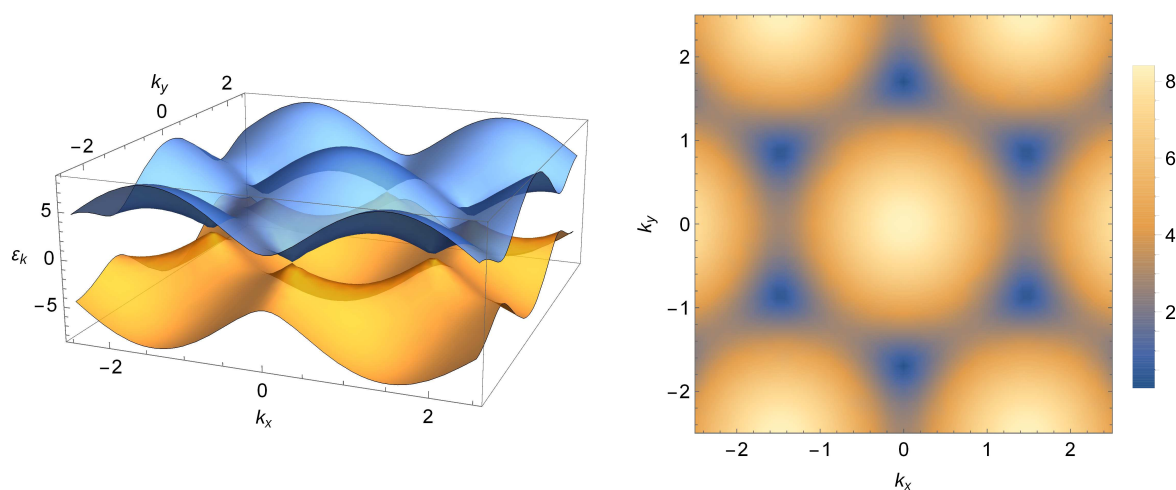


Figura 3.3: Izquierda: Bandas de valencia ($\varepsilon_{\mathbf{k}} = -t |\phi(\mathbf{k})|$) y de conducción ($\varepsilon_{\mathbf{k}} = +t |\phi(\mathbf{k})|$) según la ec. (3.5). Derecha: Gráfico de densidad para la energía $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ como función de k_x y k_y .

En la Fig. 3.3 se muestra el gráfico, en tres dimensiones, de $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ en función de \mathbf{k} . Como se aprecia, las bandas de valencia (-) y conducción (+) se tocan en seis puntos, lo cuales se denominan *puntos de Dirac*^[104]. Estos puntos definen los bordes de la primera zona de Brillouin (1ZB)^[162,163]. Por simetría del sistema, solo dos de estos seis puntos de Dirac son independientes, puesto que los demás pueden obtenerse a partir de traslaciones con vectores de la red recíproca^[16]. Los dos puntos independientes determinan los valles K y K' en grafeno.

Puesto que cada átomo de carbono aporta un electrón al orbital π , y cada estado se puede ocupar con espín up y down, entonces en el estado fundamental, sin dopar, la banda de valencia está llena y la banda de conducción vacía. Por lo tanto la energía de Fermi se ubica donde se tocan las bandas de valencia y conducción. Esto tiene importantes consecuencias, puesto que, como veremos, la densidad de estados donde se tocan las bandas es cero.

3.1.4. Aproximación a bajas energías: ecuación de Dirac

Las propiedades electrónicas de interés suceden alrededor del nivel de Fermi. Como se mencionó arriba, dicho nivel se encuentra donde se tocan las bandas de valencia y conducción. Para energías cercanas al nivel de Fermi, es decir a bajas energías, conviene expandir el Hamiltoniano de grafeno alrededor de los puntos de Dirac \mathbf{K} y \mathbf{K}' donde se tocan las bandas. Estos puntos, que definen los valles K y K' , se obtienen a partir de $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \pm t |\phi(\mathbf{k})| = 0$, lo cual de la ec. (3.5) implica

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{3a} (\sqrt{3}\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y) \quad (3.6)$$

$$\mathbf{K}' = \frac{2\pi}{3a} (\sqrt{3}\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y), \quad (3.7)$$

donde $a = \sqrt{3}d \simeq 2,46 \text{ \AA}$. Expandiendo la función $\phi(\mathbf{k})$ alrededor de estos puntos, a primer orden se obtiene^[82]

$$\phi(\mathbf{q}) = \frac{\sqrt{3}a}{2} (iq_x + \eta q_y), \quad (3.8)$$

donde $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$, con $\mathbf{k}_0 = \{\mathbf{K}, \mathbf{K}'\}$, y $\eta = 1$ para el punto de Dirac \mathbf{K} , $\eta = -1$ para el punto de Dirac \mathbf{K}' . Esta aproximación es válida solo para $\mathbf{q}a \ll 1$, lo cual a su vez implica energías $|\varepsilon_{\mathbf{k}}| \ll t \sim 3 \text{ eV}$. Substituyendo en la ec. (3.2), el Hamiltoniano efectivo a bajas energías resulta

$$H = \hbar v_F (\sigma_x q_x + \eta \sigma_y q_y), \quad (3.9)$$

donde σ_x y σ_y son las matrices de Pauli y $v_F = 3td/2\hbar \sim 10^6 \text{ m/s}$ es la velocidad de Fermi. El Hamiltoniano (3.9) es similar a la ecuación de Dirac para electrones relativistas, si la masa fuese cero^[79,80]. De esta manera se obtiene que en grafeno a bajas energías, los electrones se comportan como fermiones sin masa, con una velocidad de Fermi $v_F \sim c/300$. La relación de dispersión, a bajas energías, es entonces

$$\varepsilon_{\mathbf{q}} = \pm \hbar v_F |\mathbf{q}|. \quad (3.10)$$

Notar que la energía es independiente del valle (no depende del índice η), de manera que existe una degeneración de valle en la aproximación a bajas energías.

En la Fig. 3.4 se muestra la relación de dispersión lineal (3.10), como función de \mathbf{k} (renombrando $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{k}$). En comparación con la relación de dispersión general (3.5), la energía del sistema adquiere simetría rotacional a bajas energías. El comportamiento lineal de la relación de dispersión en grafeno está en contraste con lo que sucede típicamente en los metales, donde la relación de dispersión para los electrones libres es del tipo $\varepsilon_{\mathbf{q}} = \hbar^2 \mathbf{q}^2 / 2m^*$, siendo m^* la masa efectiva^[163]. En consecuencia, el grafeno posee propiedades únicas no presentes en otros materiales. Dichas propiedades son del tipo relativistas, puesto que la

3. Propiedades electrónicas de los materiales 2D

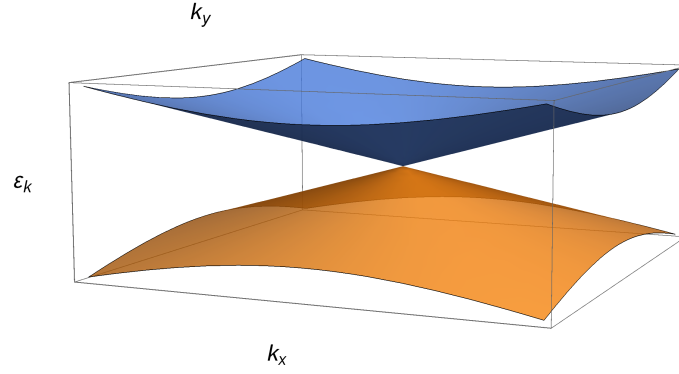


Figura 3.4: Relación de dispersión $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \pm \hbar v_F |\mathbf{k}|$ a bajas energías en grafeno.

relación de dispersión es la misma que para fermiones relativistas, sin masa. Entre estas propiedades se encuentran la paradoja de Klein^[17], en la cual la transmisión de los electrones a través de una barrera de potencial depende del ángulo de incidencia^[18,19].

3.1.5. Densidad de estados

La relación de dispersión lineal, a bajas energías, implica a su vez que la densidad de estados (DOS) también posee características únicas^[178,179]. La DOS puede calcularse fácilmente hallando la función de Green, que en la representación espectral es^[167]

$$G = \frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{1}{z - \varepsilon_{\mathbf{k}}} d^2\mathbf{k}, \quad (3.11)$$

donde $z = E + is$, siendo s un número infinitesimal, y $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \pm \hbar v_F |\mathbf{k}|$ para bajas energías [ec. (3.10)]. La DOS se obtiene tomando la parte imaginaria de la traza de G , es decir,

$$\begin{aligned} \rho(E) &= \lim_{s \rightarrow 0^+} \text{Im} [Tr(G)] \\ &= - \lim_{s \rightarrow 0^+} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{s}{(E - \lambda \hbar v_F |\mathbf{k}|)^2 + s^2} \\ &= - \frac{1}{2\pi} \int dk k \delta(E - \lambda \hbar v_F k), \end{aligned} \quad (3.12)$$

donde notamos $|\mathbf{k}| = k$. Por lo tanto, teniendo en cuenta la cuádruple degeneración debido al valle y el espín, la DOS a bajas energías en grafeno es

$$\rho(E) = \frac{2|E|}{\pi \hbar^2 v_F^2}. \quad (3.13)$$

La DOS es lineal con la energía, lo cual es de esperar puesto que la relación de dispersión es lineal. En particular, $\rho(E) = 0$ cuando $E = 0$, que es justamente donde está el nivel de

3. Propiedades electrónicas de los materiales 2D

Fermi, y las bandas de conducción y valencia se tocan. Es decir, grafeno es un semiconductor con *bandgap* cero o un semi-metal. Esto difiere substancialmente de lo que sucede en un típico gas de electrones 2D (2DEG)^[104], con una relación de dispersión del tipo $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m^*$, donde la DOS es constante $\rho(E)_{2D} = gm^* / 2\pi\hbar^2$, siendo g un factor de degeneración^[162,167]. Hay que destacar, sin embargo, que la DOS dada por la ec. (3.13) es válida solo a bajas energías, tales que $|E| \ll t \sim 3$ eV.

3.1.6. Niveles de Landau

A continuación obtendremos el espectro de energías de grafeno bajo la aplicación de un campo magnético B perpendicular. De manera general, dicho espectro se obtiene del Hamiltoniano de TB [ec. (3.2)], considerando el efecto de B a través de la substitución de Peierls^[180,181] $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - e\mathbf{A}$, donde \mathbf{A} es el vector potencial asociado a B , tal que $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z = \nabla \times \mathbf{A}$ (tomamos el eje z como la dirección perpendicular al grafeno, ubicado en el plano xy). Esta substitución es válida siempre que el parámetro de red a sea mucho menor que la longitud magnética $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$, que representa la longitud fundamental del sistema en presencia de un campo magnético. Puesto que $a \simeq 2,46$ Å y $l_B \simeq 260/\sqrt{B[\text{T}]}$ Å, la condición $a \ll l_B$ se satisface incluso para campos relativamente grandes (digamos $B \simeq 10$ T).

Considerando entonces la substitución de Peierls, el efecto del campo magnético es un desfase $ie\mathbf{A}$ en la función de onda. La resolución completa del problema implicaría encontrar los autoestados y autovectores de la ec. (3.2) con $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - e\mathbf{A}$. El resultado es el patrón fractal de Hofstadter (*Hofstadter's Butterfly*) para los niveles de energías^[182,183]. Sin embargo, a fines prácticos, para energías cercanas al nivel de Fermi ($\ll 3$ eV), es suficiente con considerar la substitución de Peierls en la ec. (3.9).

Ahora bien, para un campo magnético $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$, en el gauge de Landau tenemos^[184] $\mathbf{A} = -By\mathbf{e}_x$. Considerando a su vez el efecto Zeeman^[76,185], el término $\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = \mu_B g B s_z / 2$ se agrega a H , donde $s_z = 2S_z/\hbar$ es la matriz de Pauli actuando en los estados de espín, y g es el factor- g (consideraremos $g \simeq 2$, lo cual es una buena aproximación en grafeno^[186]). Luego, para el valle K ($\eta = 1$), la ec. (3.9) resulta

$$H = v_F [\sigma_x (p_x + eBy) + \sigma_y p_y] - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}. \quad (3.14)$$

Puesto que H solo depende de la coordenada y , podemos expresar la función de onda como $\psi = e^{-ikx} (\psi^A \ \psi^B)$, con $\psi^{A/B}$ dependiendo solo de y . Así, reemplazando $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$, la ecuación $H\psi = E\psi$ queda

$$[v_F \sigma_x (-\hbar k + eBy) - v_F i \hbar \sigma_y \partial_y - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}] \psi = E\psi. \quad (3.15)$$

3. Propiedades electrónicas de los materiales 2D

Para obtener los autoestados E , conviene seguir el procedimiento usual para resolver el oscilador armónico en mecánica cuántica, introduciendo operadores de creación y destrucción^[76]. En este caso, conviene introducir los operadores escalera $\sigma_{\pm} = \sigma_x \pm i\sigma_y$, de manera que realizando el cambio de variables $y' = (-\hbar k + eBy) / \sqrt{\hbar e B}$, resulta

$$\left[v_F \sqrt{\hbar e B} \frac{\sigma_+}{2} (y' - \partial_{y'}) + v_F \sqrt{\hbar e B} \frac{\sigma_-}{2} (y' + \partial_{y'}) - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \right] \psi = E\psi. \quad (3.16)$$

Se obtiene así un Hamiltoniano idéntico al de un oscilador armónico cuántico. En efecto, definiendo los operadores de creación y destrucción $a^\dagger = (y' - \partial_{y'}) / \sqrt{2}$ y $a = (y' + \partial_{y'}) / \sqrt{2}$, nos queda

$$\left[\frac{\hbar\omega_L}{2} (\sigma_+ a^\dagger + \sigma_- a) - s_z \mu_B B \right] \psi = E\psi, \quad (3.17)$$

donde $\omega_L = v_F \sqrt{2eB/\hbar}$ es la frecuencia de ciclotrón^[82]. Ahora bien, teniendo en cuenta que en general $a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$ y $a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$, mientras que $\sigma_+ |A\rangle = 0$, $\sigma_+ |B\rangle = 2|A\rangle$, $\sigma_- |A\rangle = 2|B\rangle$, $\sigma_- |B\rangle = 0$, entonces las energías de la ec. (3.17) se pueden calcular proponiendo la función de onda

$$|\psi\rangle = c_1 |n, A, +\rangle + c_2 |n-1, B, +\rangle + c_3 |n, A, -\rangle + c_4 |n-1, B, -\rangle, \quad (3.18)$$

donde c_i son factores a determinar y $|\pm\rangle$ representan espín up y down, tal que $s_z |\pm\rangle = \pm |\pm\rangle$. Luego, resolviendo el sistema se obtienen los NL

$$\varepsilon_{n,s,\lambda} = \lambda\alpha\sqrt{Bn} - s\mu_B B, \quad (3.19)$$

donde $\alpha = v_F \sqrt{2e\hbar}$, $\lambda = \pm 1$ para las bandas de conducción y valencia, y $s = \pm 1$ para los espines up y down. Puede probarse que, realizando el mismo procedimiento, las energías para el valle K' son idénticas^[82], por lo que cada NL tiene una degeneración de valle (como ocurre sin campo magnético; ver ec. (3.10)). Como es de esperar, el efecto Zeeman introduce un *gap* en los NL igual a $\Delta E = 2\mu_B B$. A su vez, como sucede en el caso clásico^[104], cada nivel de energía posee una degeneración $D = 2ABe/h$ (donde el factor de 2 tiene en cuenta la degeneración de valle) debido a que el número cuántico k_x puede tomar valores $k_x = 2\pi m/L$, donde m es un entero y L es el lado de grafeno.

En la Fig. 3.5 se muestran los niveles de energía dados por la ec. (3.19), para la banda de conducción con $1 \leq n \leq 20$, en función de B y considerando el desdoblamiento de espín (DE) de cada NL. Como se observa, y efectivamente nos dice la ec. (3.19), los NL en grafeno no son equidistantes, debido a su dependencia del tipo \sqrt{n} con el índice de Landau. Es decir, la diferencia $|\varepsilon_{n,s,\lambda} - \varepsilon_{n\pm 1,s,\lambda}|$ depende de n . Esto contrasta lo que sucede en un 2DEG, donde los NL son clásicos del tipo $\varepsilon_n = aB(n + 1/2)$, y por lo tanto equidistantes.

3. Propiedades electrónicas de los materiales 2D

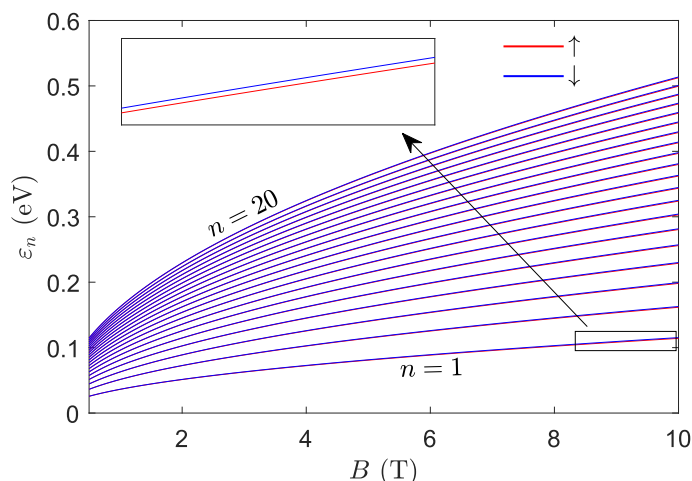


Figura 3.5: Niveles de Landau en grafeno, dados por la ec. (3.19), para la banda de conducción ($\lambda = 1$) con $1 \leq n \leq 20$, como función de B . En rojo se muestran los NL para espín up y en azul los NL para espín down.

La no equidistancia de los NL tiene importantes consecuencias en las excitaciones entre diferentes niveles de energía^[187-189]. En efecto, puesto que la diferencia entre los NL disminuye al aumentar n , entonces existe una mayor probabilidad de excitación entre NL altos que entre NL bajos. Otra cuestión fundamental es que el NL $n = 0$ es nulo (obviando el desdoblamiento de espín), lo cual nuevamente contrasta con el caso clásico, donde $\varepsilon_{n=0} = aB/2$. A su vez, puesto que en grafeno las bandas de valencia y conducción justamente se tocan en el nivel de Fermi $E_F = 0$, entonces el NL $n = 0$ está compartido con electrones y huecos, cada uno con una degeneración $D/2$ ^[16,82]. Esta peculiaridad del NL $n = 0$ da lugar, entre otras cosas, al efecto Hall anómalo en grafeno^[32,33,190]. También tiene consecuencias en cuanto a cómo es la fase de las oscilaciones magnéticas, como veremos en el capítulo siguiente.

También es importante recalcar la dependencia de los NL en grafeno con el campo magnético, del tipo \sqrt{B} , lo cual también contrasta con la dependencia del tipo B en los NL clásicos^[104]. Esto implica que en grafeno los NL decaen más lentamente con el campo magnético. A su vez, implica que el *scattering* de los electrones en grafeno, en un campo magnético, es diferente que en el caso clásico. En particular, el ensanchamiento de la DOS de los NL, debido al *scattering* con impurezas por ejemplo, tiene una dependencia con el campo B que es distinta a lo que se observa en un típico metal^[109].

Por último, es importante destacar que la energía de ciclotrón de los NL es relativamente grande, en comparación a un típico metal 3D^[82]. En efecto, de la ec. (3.19) tenemos la energía de ciclotrón $\hbar\omega_L = \alpha\sqrt{B}$, la cual para campos magnéticos usuales tiene un orden de magnitud dos veces más grande que en un 2DEG^[16,104]. En consecuencia, fenómenos cuánticos en grafeno en campos magnéticos pueden observarse incluso a temperaturas altas^[144]. Por ejemplo, se ha registrado el efecto Hall en grafeno a temperatura ambiente^[191]. Como

3. Propiedades electrónicas de los materiales 2D

veremos en los próximos capítulos, la alta energía de los NL en grafeno tiene también fuertes implicaciones en las oscilaciones magnéticas. En particular, en cómo afecta la temperatura el decaimiento y la observación de las oscilaciones.

3.2. Materiales 2D con *buckling*

Desde la obtención experimental del grafeno en 2004, ha habido una proliferación de materiales 2D similares^[7,8]. Mientras que el grafeno está basado en Carbono, los nuevos materiales están basados en Silicio^[49], Germanio^[53] o Estanio^[54]. Estos materiales 2D poseen la misma estructura hexagonal bidimensional del grafeno (tipo panel de abeja), de manera que también poseen propiedades únicas, tales como una relación de dispersión del tipo relativista a bajas energías ($\varepsilon_{\mathbf{k}} \sim |\mathbf{k}|$). De hecho, algunos de estos materiales poseen características más impresionantes que el grafeno, en especial en relación a la posibilidad de manipular el *bandgap*^[63,64].

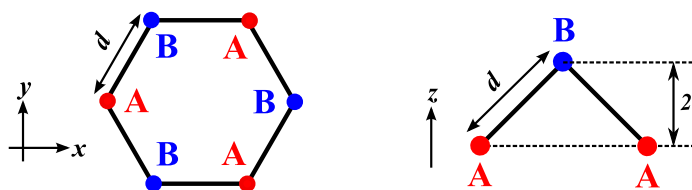


Figura 3.6: Red hexagonal en los materiales 2D con *buckling*. En la izquierda se muestra la representación plana del hexágono que forman las subredes *A* y *B*. En la derecha se muestra el *buckling* entre las subredes *A* y *B*, que implica una separación vertical $2l$ entre ellas.

A pesar de las similitudes de los nuevos materiales 2D con el grafeno, existen importantes diferencias entre ellos. Una es la existencia de un *buckling* (separación vertical) entre las subredes *A* y *B*^[50]. Dicha configuración geométrica se muestra esquemáticamente en la Fig. 3.6. Vemos que, mientras que en el plano se mantiene la red hexagonal, existe una altura de separación $2l$ entre las subredes *A* y *B*. Esta separación implica que, por ejemplo, al aplicar un campo eléctrico perpendicular E_z se produce una diferencia de energía $2leE_z$ entre ambas subredes^[55,192].

Otra diferencia importante es la existencia de una interacción espín-órbita (IEO) no despreciable en los materiales 2D con *buckling*^[56,193,194]. En grafeno la IEO es despreciable^[195], principalmente debido a su simetría plana, sin separación vertical entre las subredes. En cambio, en los materiales como siliceno dicha simetría se rompe debido al *buckling* de la red. Esto conlleva a que el valor efectivo de la IEO en esta clase de materiales 2D no pueda, en general, despreciarse^[194]. De hecho, como veremos más adelante, la IEO introduce un

3. Propiedades electrónicas de los materiales 2D

bandgap en estos materiales (recordar que en grafeno no hay un *bandgap*). En la Tabla 3.1 se muestran los parámetros para grafeno y algunos materiales 2D con *buckling*.

	t (eV)	v_F (10^5 m/s)	a (Å)	λ_{SO} (meV)	l (Å)
Grafeno	2.8	9.8	2.46	10^{-3}	0
Siliceno	1.6	5.5	3.86	3.9	0.23
Germaneno	1.3	4.6	4.02	43	0.33
Estaneno	1.3	4.9	4.70	100	0.4

Tabla 3.1: Parámetros para grafeno y los materiales 2D^[56].

En lo que sigue discutiremos las propiedades básicas de estos materiales 2D, de la misma manera que se hizo en grafeno. También obtendremos las propiedades electrónicas utilizando el modelo de TB, teniendo en cuenta el *buckling* de la red y la IEO. En particular, nos focalizaremos en los materiales 2D siliceno, germaneno y estaneno. De todas maneras la discusión se puede extender naturalmente a otros materiales 2D más recientes, con igual estructura, tales como el fosforeno^[46,196].

3.2.1. Estructura geométrica

La descripción de la estructura geométrica de los materiales 2D con *buckling* es similar a la de grafeno (sección 3.1.2), teniendo en cuenta la altura de separación $2l$ entre las subredes A y B (Fig. 3.6). Por lo tanto, los vectores primitivos pueden tomarse como los mismos que en grafeno, esto es, $\mathbf{a}_1 = d(3\mathbf{e}_x + \sqrt{3}\mathbf{e}_y)/2$ y $\mathbf{a}_2 = d(3\mathbf{e}_x - \sqrt{3}\mathbf{e}_y)/2$, donde d es la distancia entre átomos en la red. La altura del *buckling* se considera con la posición de los átomos en la base. Así, si $z = 0$ para los átomos A , entonces la base de la celda primitiva está dada por $\mathbf{r}_A = 0$ (poniendo el origen sobre el átomo en la subred A) y $\mathbf{r}_B = d\mathbf{e}_x + 2l\mathbf{e}_z$, donde $2l$ es la altura del *buckling* entre las subredes. Para un átomo A , los primeros tres vecinos B están en posiciones $\mathbf{n}_1 = d\mathbf{e}_x + 2l\mathbf{e}_z$, $\mathbf{n}_2 = d(-\mathbf{e}_x + \sqrt{3}\mathbf{e}_y)/2 + 2l\mathbf{e}_z$ y $\mathbf{n}_3 = -d(\mathbf{e}_x + \sqrt{3}\mathbf{e}_y)/2 + 2l\mathbf{e}_z$.

3.2.2. Modelo de *Tight Binding*

El Hamiltoniano de TB es similar al de grafeno [ec. (3.1)], pero teniendo en cuenta la IEO y el *buckling* entre las subredes^[56]. La IEO se debe a la interacción efectiva del movimiento orbital de los electrones con su espín. En general, la IEO se obtiene de la ecuación de Pauli^[76,79]

$$H_{SO} = -\frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\mathbf{F} \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (3.20)$$

donde $\mathbf{F} = -\nabla V$ es la fuerza que sienten los electrones debido a un potencial V , m_0 es la masa del electrón libre y $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ es el vector con las matrices de Pauli. En un

3. Propiedades electrónicas de los materiales 2D

material sólido existen dos componentes para la IEO: una intrínseca (o efectiva) y otra de Rabsha^[197,198]. La IEO intrínseca es debido a la componente de la fuerza paralela a la red, mientras que la IEO de Rabsha es debido a la componente perpendicular de la fuerza. En general, en los materiales 2D el término intrínseco es más grande, de manera que es buena aproximación despreciar la IEO de Rabsha^[59,88].

La IEO intrínseca depende de si la interacción considerada es a primeros vecinos o segundos vecinos. En materiales 2D con una estructura hexagonal, la IEO a primeros vecinos es nula debido a la simetría de espejo (*mirror symmetry*) de la red alrededor de cualquier enlace^[56]. Solo queda entonces la IEO a segundos vecinos, la cual es despreciable en grafeno debido a su estructura plana (alrededor de $\sim 10^{-3}$ meV)^[195]. En cambio, en los materiales 2D con *buckling*, la IEO a segundos vecinos no es despreciable debido a la altura de separación entre las subredes. La magnitud de la IEO depende de la geometría de la red, y de cómo son los valores de las integrales de solapamiento entre los diferentes orbitales, para cada tipo de material 2D. El cálculo detallado muestra que el Hamiltoniano efectivo debido a la IEO intrínseca en los materiales 2D resulta^[56]

$$H_{SO}^{2D} = i \frac{\lambda_{SO}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle_{\alpha\beta}} v_{ij} c_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^z c_{j\beta}, \quad (3.21)$$

donde $\langle\langle i,j \rangle\rangle$ denota sumatoria a segundos vecinos, λ_{SO} es el valor de la IEO, α y β suman sobre las subredes A y B , y $\sigma_{\alpha\beta}^z$ son las componentes de la matriz de pauli σ_z proyectada en las subredes, $v_{ij} = \mathbf{d}_i \times \mathbf{d}_j / |\mathbf{d}_i \times \mathbf{d}_j|$ donde \mathbf{d}_i y \mathbf{d}_j son los vectores que conectan las distancias a segundos vecinos d_{ij} , tal que $v_{ij} = +1$ si el *hoping* a segundos vecinos es en sentido antihorario y $v_{ij} = -1$ si el *hoping* a segundos vecinos es en sentido horario.

De esta manera, teniendo en cuenta la aplicación de un campo eléctrico perpendicular E_z , que genera una diferencia de potencial entre las subredes, el Hamiltoniano total de TB en los materiales 2D queda^[50,51]

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle_{\alpha\beta}} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta} + i \frac{\lambda_{SO}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle_{\alpha\beta}} v_{ij} c_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^z c_{j\beta} - e l E_z \sum_{i\alpha} \mu_i c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha}, \quad (3.22)$$

donde $\mu_i = +1$ (-1) para la subred A (B). El primer término en H es la usual interacción a primeros vecinos (como en grafeno), el segundo es la IEO intrínseca, mientras que el tercero es la diferencia de energía entre subredes debido a E_z y el *buckling* de la red. El Hamiltoniano H puede diagonalizarse de manera similar a como se realizó en grafeno^[55]. Para simplificar, omitiremos este procedimiento, destacando solamente que, a diferencia del grafeno, la IEO introduce un *bandgap* en la relación de dispersión, incluso a $E_z = 0$. Dicho *bandgap* puede ser modificado cambiando el valor del campo eléctrico.

3. Propiedades electrónicas de los materiales 2D

3.2.3. Aproximación a bajas energías

La aproximación a bajas energías del Hamiltoniano (3.22) se realiza de manera análoga a como se hizo en grafeno. Es decir, se expande en \mathbf{k} alrededor de los puntos \mathbf{K} y \mathbf{K}' , los cuales delimitan la 1ZB y definen los vallesⁱ K y K' . De esta manera se demuestra que, a bajas energías, se obtiene el Hamiltoniano efectivo^[50]

$$H = \hbar v_F (\eta \sigma_x q_x + \sigma_y q_y) + \Delta_{\eta s} \sigma_z, \quad (3.23)$$

donde v_F es la velocidad de Fermi (dependiente del material 2D; ver Tabla 3.1), σ son las matrices de Pauli actuando en las subredes, $\eta = \pm 1$ para los valles K y K' , $s = \pm 1$ para los espines up y down, y

$$\Delta_{\eta s} = \eta s \lambda_{SO} - elE_z. \quad (3.24)$$

El factor $\Delta_{\eta s}$ tiene en cuenta el efecto debido a la IEO y la presencia de un campo eléctrico. El Hamiltoniano (3.23) es análogo a la ecuación de Dirac, como sucede en grafeno. De hecho, grafeno puede pensarse como un caso particular, con $\lambda_{SO} \simeq 0$ y $l = 0$ (red plana sin *buckling*). La presencia de IEO y *buckling* se ve entonces reflejada como un término de *masa* en la ecuación de Dirac^[80], que a su vez genera un *bandgap*. El valor de esta masa es diferente para cada valle, puesto que $\Delta_{\eta s}$ depende de η . Vale destacar que la ec. (3.23) es válida solo a bajas energías tales que $|E| \ll t$, donde t es la integral de solapamiento, dependiente del material (ver Tabla 3.1).

Del Hamiltoniano efectivo (3.23) se obtiene la relación de dispersión a bajas energías

$$\varepsilon_{\mathbf{q}} = \pm \sqrt{(\hbar v_F |\mathbf{q}|)^2 + (\Delta_{\eta s})^2}, \quad (3.25)$$

que es igual a la energía de un electrón relativista, con un término de masa dado por $\Delta_{\eta s}$. Notar que, a diferencia de grafeno [ec. (3.10)], la relación de dispersión (3.25) depende del valle y el espín. Es decir, debido a un campo eléctrico E_z hay una ruptura en la degeneración de valle y espín. La dependencia es tal que, para ambas bandas (± 1), los niveles de energía se desdoblan. En particular, puesto que $|\Delta_{11}| = |\Delta_{-1-1}|$ y $|\Delta_{1-1}| = |\Delta_{-11}|$, la energía se desdobla en dos, como se indica en la Fig. 3.7(a) (para $elE_z > \lambda_{SO}$). El *bandgap* entre las bandas es entonces $2|\Delta_{\eta s}| = 2|\eta s \lambda_{SO} - elE_z|$, que depende del valor de E_z en relación a $E_r \equiv \lambda_{SO}/el$, como puede observarse en la Fig. 3.7(b), donde se graficó esquemáticamente el *bandgap* en función de E_z . Para $|E_z| < E_r$, el *bandgap* es máximo para $E_z = 0$ (igual a $2\lambda_{SO}$) pero disminuye al aumentar $|E_z|$, siendo cero cuando $|E_z| = E_r$, donde entonces el material 2D se comporta como grafeno. Para $|E_z| > E_r$ el *bandgap* vuelve a crecer al

ⁱNotar que en los materiales 2D con *buckling*, las bandas de valencia y conducción no se tocan en los puntos \mathbf{K} y \mathbf{K}' , como sucede en grafeno, debido a la existencia de un *bandgap* causado por la IEO λ_{SO} y/o el campo eléctrico perpendicular E_z .

3. Propiedades electrónicas de los materiales 2D

incrementar $|E_z|$. El hecho de que el *bandgap* pueda controlarse simplemente con el valor del campo E_z da lugar a una mayor capacidad de manipulación de las propiedades electrónicas en los materiales 2D con *buckling*, en comparación con grafeno.

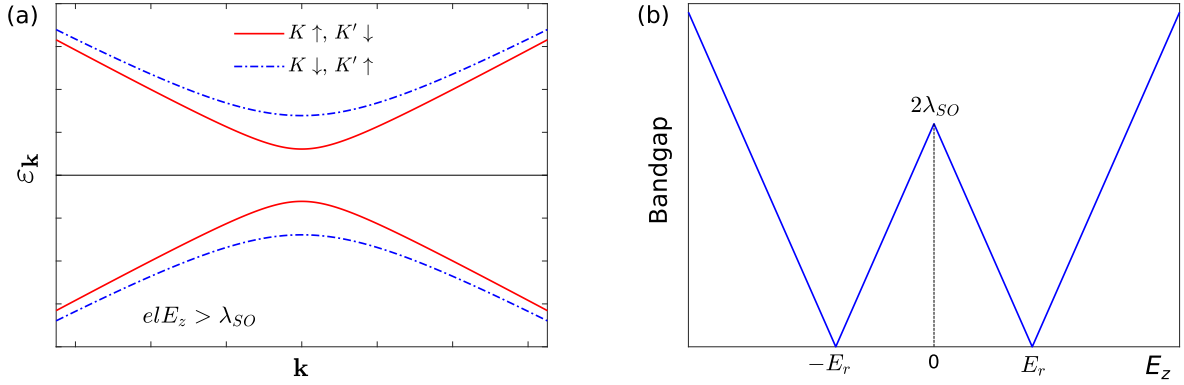


Figura 3.7: (a) Relación de dispersión (3.25) para $elE_z > \lambda_{SO}$. (b) Bandgap $2|\Delta_{\eta s}| = 2|\eta s \lambda_{SO} - elE_z|$ como función de E_z , donde $E_r = \lambda_{SO}/el$.

3.2.4. Niveles de Landau

En un campo magnético perpendicular $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$, los niveles de energías se obtienen con la substitución de Peierls^[180] $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - e\mathbf{A}$, donde \mathbf{A} es el vector potencial. Como en grafeno, esto es válido si $a \ll l_B$, donde a es el parámetro de red y $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$ es la longitud magnética. Esto se satisface a campos magnéticos moderados para todos los materiales 2D (ver Tabla 3.1). Así, considerando el gauge de Landau $\mathbf{A} = -By\mathbf{e}_x$, y el efecto Zeeman con el término $\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = \mu_B g B s_z / 2$ (seguiremos tomando $g \simeq 2$ en todos los materiales 2D^[186,199]), la ec. (3.23) resulta

$$H = v_F [\eta \sigma_x (p_x + eBy) + \sigma_y p_y] + \sigma_z \Delta_{\eta s} - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}. \quad (3.26)$$

Análogamente al procedimiento realizado en grafeno (sección 3.1.6), la ecuación $H\psi = E\psi$ se puede escribir en función los operadores de creación y destrucción $a^\dagger = (y' - \partial_{y'})/\sqrt{2}$ y $a = (y' + \partial_{y'})/\sqrt{2}$, donde $y' = (-\hbar k + eBy)/\sqrt{\hbar eB}$. El resultado es

$$\left[\eta \frac{\hbar \omega_L}{2} (\sigma_+ \alpha_\eta^\dagger + \sigma_- \alpha_\eta) + \sigma_z \Delta_{\eta s} - s_z \mu_B B \right] \psi_{\eta s} = E \psi_{\eta s}, \quad (3.27)$$

donde $\alpha_1 = a$, $\alpha_{-1} = a^\dagger$ y $\omega_L = v_F \sqrt{2eB/\hbar}$ es la frecuencia de ciclotrón (igual que en grafeno). Las energías se pueden calcular escribiendo la función de onda para cada valle y

3. Propiedades electrónicas de los materiales 2D

espín como

$$|\psi_s^\eta\rangle = a_s^\eta |n, A, s\rangle + b_s^\eta |n - \eta, B, s\rangle, \quad (3.28)$$

donde a_s^η son b_s^η constantes a determinar, n es el índice de NL y $|s\rangle = |\pm\rangle$ representa los estados espín, tal que $s_z |s\rangle = s |s\rangle$. Luego, puesto que $\sigma_+ |A\rangle = 0$, $\sigma_+ |B\rangle = 2 |A\rangle$, $\sigma_- |A\rangle = 2 |B\rangle$, $\sigma_- |B\rangle = 0$, $\sigma_z |A\rangle = |A\rangle$, $\sigma_z |B\rangle = -|B\rangle$ y $a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$, $a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$, resolviendo la ec. (3.27) se obtiene el espectro de energía

$$\varepsilon_{0,\eta,s} = s\lambda_{SO} - \eta el E_z - s\mu_B B \quad (n = 0) \quad (3.29)$$

$$\varepsilon_{n,\eta,s,\lambda} = \lambda \sqrt{(s\lambda_{SO} - \eta el E_z)^2 + \alpha^2 B n} - s\mu_B B \quad (n \geq 1), \quad (3.30)$$

donde $\lambda = \pm 1$ para las bandas de valencia y conducción y $\alpha = v_F \sqrt{2e\hbar}$. Vale destacar que estos niveles de energía se reducen a los de grafeno [ec. (3.19)] si $\lambda_{SO} \simeq 0$ y $l = 0$. De manera similar a como ocurre sin campo magnético, cuando $E_z = 0$ los NL tiene una doble degeneración de valle, mientras que si $E_z \neq 0$ dicha degeneración desaparece. Notar que sin el efecto Zeeman el NL $n = 0$ tiene siempre dos veces menor degeneración que los NL $n \geq 1$, independientemente del valor de E_z . A su vez, cada NL tiene una degeneración $D = \mathcal{A} B e / h$, donde \mathcal{A} es el área del sistema.

Capítulo 4

Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

En el estado fundamental las oscilaciones magnéticas (OM) dependen solamente de cómo es la ocupación de los niveles de Landau (NL). Así, las propiedades únicas de los NL en los materiales 2D, debidas a su naturaleza no equidistante y su alta energía de ciclotrón, se reflejan de manera directa en la magnetización. La ruptura de la degeneración de espín, debida al efecto Zeeman, o la ruptura de la degeneración de valle, debido a un campo eléctrico perpendicular, también definen el perfil de las oscilaciones. El resultado es que uno puede *mapear* las propiedades del material solo con el estudio de cómo varía la magnetización al variar el campo magnético. En este sentido, las oscilaciones magnéticas pueden pensarse como una suerte de *huella dactilar* del material.

En este capítulo se realiza un análisis exhaustivo de las OM en el estado fundamental de los materiales 2D. Se desarrolla primero una formulación general, asumiendo un sistema 2D con niveles de Landau generales. Dicha formulación se aplica luego al caso de grafeno y los materiales 2D con *buckling*. La descripción de las OM se realiza distinguiendo siempre los casos del sistema con una densidad electrónica n_e constante, o una energía de Fermi μ constante.

4.1. Formulación general

En esta sección se desarrollará una formulación general de las OM en el estado fundamental, asumiendo un sistema 2D general. La formulación se realizará distinguiendo entre los casos del sistema con una cantidad de electrones N constante, y el sistema con una energía de Fermi μ constante. En cada caso se obtiene una expresión para la magnetización, de donde se determina cómo son la fase y las amplitudes de las OM. La formulación general

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

será luego aplicada, en las siguientes secciones, a las OM en grafeno y los materiales 2D con *buckling*.

4.1.1. Niveles de Landau

Empezamos definiendo los niveles de Landau a partir de los cuales se desarrollará el formalismo. En el capítulo anterior se vio que, en los materiales 2D, los NL tiene una dependencia que difiere substancialmente con lo que ocurre en los metales 3D, o de hecho en el mismo gas de electrones 2D clásico (2DEG)^[104]. Así, mientras los NL clásicos tiene una dependencia lineal con el índice de Landau n y el campo magnético B , en los materiales 2D hemos visto que los NL son relativistas, con una dependencia del tipo \sqrt{Bn} . Esto implica que los NL no son equidistantes, lo cual puede tener importantes consecuencias en el comportamiento de estos sistemas. Por ejemplo, al aumentar la ocupación de los NL, el gap entre los mismos decrece de forma tal que la energía de excitación de un nivel a otro disminuye.

Otra distinción importante, al comparar los NL clásicos con los NL en los materiales 2D, es que estos últimos en general pueden depender significativamente con los índices de espín y valle, y/o otros índices, tales como el vector de onda en la dirección paralela al plano del material (por ejemplo ante la aplicación de un campo eléctrico paralelo^[155]). Este tipo de dependencias puede decirse que son, de alguna manera, la *huella* de las propiedades del material en sus niveles de energía. En otras palabras, surgen a raíz de las propiedades geométricas y electrónicas únicamente presentes en los materiales 2D. En consecuencia, un análisis detallado de los NL puede permitir dilucidar características intrínsecas del sistema en cuestión.

Estas consideraciones requieren un esquema general para ser tratadas en el marco de las oscilaciones magnéticas en los materiales 2D, cuya concepción original en los metales 3D no resulta, en general, aplicable. Por ello es conveniente realizar una descripción de los NL que tenga en cuenta todas sus posibles dependencias con índices (espín, valle, etc.) y variables (campos magnéticos, eléctricos, etc.). Suponemos entonces un sistema 2D en presencia de un campo magnético perpendicular B , con niveles de Landau discretos $\varepsilon_{n;\gamma}(B; X)$, donde n es el índice de NL. Con el índice γ denotamos todos los otros índices (además de n) con los cuales los niveles de energía pueden depender, tales como el espín s , el valle η , o el vector de onda k . Con X denotamos todas las otras variables (además de B) con las cuales $\varepsilon_{n;\gamma}$ puede depender, tales como campos eléctricos perpendiculares o paralelos, y/o campo magnético paralelo. Vale destacar que en todos los casos existe un campo magnético perpendicular B que causa el NL discreto n , razón por la cual los separamos. Las demás variables o índices pueden o no estar presentes, dependiendo del sistema en particular. A su vez, asumiremos que cada nivel de energía $\varepsilon_{n;\gamma}$ tiene una degeneración ϱ , que puede ser la degeneración $D = \mathcal{A}B/\phi$ ($\phi = h/e$) en caso de que los niveles de energía no dependan del vector de onda,

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

y/o cualquier otra degeneración adicional al sistema, tal como la degeneración de espín o valle. Al igual que con $\varepsilon_{n;\gamma}$, el valor específico de ϱ depende del sistema en particular. En la Tabla 4.1 se muestran algunos ejemplos de estos NL en sistemas 2D. En todos los casos, a es una constante que depende de las propiedades del material.

Sistema	Niveles de energía $\varepsilon_{n;\gamma}$	γ	X
2DEG ^[104]	$aB(n + 1/2)$	–	–
Grafeno con DE ^[82]	$a\sqrt{Bn} - s\mu_B B$	s	–
Siliceno con DE y E_z ^[50]	$[(s\lambda_{SO} - \eta e l E_z)^2 + a^2 B n]^{1/2} - s\mu_B B$	η, s	E_z
<i>Bilayer</i> grafeno ^[84]	$aB\sqrt{n(n+1)}$	–	–
Grafeno con E_{\parallel} ^[155]	$a\sqrt{nB} \left[1 - (E_{\parallel}/v_F B)^2 \right]^{3/4} + \hbar E_{\parallel} k/B$	k	E_{\parallel}

Tabla 4.1: Ejemplos de niveles de energía $\varepsilon_{n;\gamma}$ en sistemas 2D. En todos los casos a es un parámetro que depende del material.

En el estado fundamental del sistema será necesario considerar cómo están ordenados los niveles de energía, en especial en el caso que la densidad electrónica sea constante. Por ello consideraremos, de manera general, que los niveles de energía $\varepsilon_{n;\gamma}$ están ordenados, de manera descendente en energía, como ε_r , donde $r = 1, 2, 3, \dots$ es el parámetro de ordenamiento. Este ordenamiento es para los índices $\{n; \gamma\}$. Es decir, dependiendo del valor de las variables $(B; X)$, los niveles de energía siguen un ordenamiento de los índices $n_r; \gamma_r$. Por ejemplo, para el caso más simple de $\gamma = 0$ (los niveles solo dependen del índice de NL n), está claro que $n_r = r$. En condiciones usuales, con $X = 0$, los índices ordenados $n_r; \gamma_r$ tienen una dependencia fija con el parámetro de ordenamiento r , la cual se mantiene al variar el campo magnético B . Sin embargo, en casos más generales la situación se empieza a complicar. De hecho, como veremos más adelante, para niveles de energía con $X = E_z$ (ver Tabla 4.1), el ordenamiento de n_r, η_r y s_r a campos eléctricos relativamente altos no sigue un patrón fijo, de forma tal que la dependencia de los índices con r depende de las variables $(B; X)$.

4.1.2. Oscilaciones magnéticas para N constante

Para el caso de una densidad electrónica n_e constante, trabajamos en el ensamble canónico^[153,154], donde la variable fundamental es la energía de Helmholtz F , que en el estado fundamental ($T = 0$) es igual a la energía interna U . Consideraremos n_e asociada a la banda de conducción, de manera que ignoraremos la contribución no oscilatoria de la banda de valencia. Así, asumimos $n_e = N/\mathcal{A}$, donde N son la cantidad de electrones de conducción y \mathcal{A} es el área del sistema 2D. El control del valor de n_e puede deberse, por ejemplo, a la

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

aplicación de un *gate voltage*^[148,149,200]. Asumiremos que los niveles de energía $\varepsilon_{n;\gamma}(B; X)$ están ordenados, de manera descendente, como ε_r , donde $r = 1, 2, 3, \dots$ es el parámetro de ordenamiento.

4.1.2.1. Energía y magnetización

En el estado fundamental la energía del sistema es la mínima posible, por lo que solo se llenan los niveles de energía más bajos. Cada nivel de energía tiene degeneraciónⁱ $D = \lambda \mathcal{A} n_B$, donde $n_B = Be/h$ es el flujo magnético unidad y λ es la degeneración adicional debida al espín o valle. En los materiales 2D, el nivel $n = 0$ es compartido por electrones y huecos, de forma que para los electrones de conducción su degeneración es $D/2$. Por simplicidad asumiremos n_e y B tales que el NL $n = 0$ está siempre ocupado y entonces lo ignoraremosⁱⁱ. Los restantes $N - 2D/\lambda$ electronesⁱⁱⁱ llenan los NL $n \geq 1$. El número de niveles completamente llenos es^{iv} $q - 1 = \text{floor}[(N - 2D/\lambda)/D]$, que en función del factor de llenado $\nu = n_e/n_B$ puede escribirse

$$q - 1 = \text{floor} \left[\frac{\nu - 2}{\lambda} \right]. \quad (4.1)$$

Esto implica que existe un cambio de nivel de energía para factores de llenado $\nu = q\lambda + 2$, donde q es un entero. El último nivel de energía ε_q está, en general, parcialmente lleno con $N - 2D/\lambda - D(q - 1)$ electrones. Definimos a $\theta = N/D - 2/\lambda - (q - 1)$ como el factor de ocupación del último NL ocupado ($0 \leq \theta \leq 1$), tal que $D\theta$ electrones ocupan el nivel ε_q . En función del factor de llenado se tiene

$$\theta = \frac{\nu - 2}{\lambda} - \text{floor} \left[\frac{\nu - 2}{\lambda} \right]. \quad (4.2)$$

De esta manera la energía interna es

$$U = \sum_{r=1}^{q-1} D\varepsilon_r + D\theta\varepsilon_q. \quad (4.3)$$

ⁱEn lo que sigue asumiremos que los NL no dependen del vector de onda k y por lo tanto tienen degeneración $\mathcal{A} n_B$ (para cada índice γ). Este será la situación para los casos en que aplicaremos la formulación general. De todos modos, la generalización es trivial considerando una degeneración arbitraria ϱ .

ⁱⁱLo ignoramos puesto que nos interesan aquí las oscilaciones magnéticas, causadas por los cambios que ocurren en el último nivel de energía ocupado (ver sección 2.1.2).

ⁱⁱⁱTeniendo en cuenta que la degeneración extra de espín y valle está dada por λ , existen $4/\lambda$ niveles de energía por cada NL n . Así, el nivel $n = 0$ de conducción está ocupado con $\frac{4}{\lambda} \left(\frac{D}{2} \right) = 2D/\lambda$ electrones, de manera que restan $N - 2D/\lambda$ electrones para llenar los NL $n \geq 1$. Notar que siempre se tiene $2D/\lambda = 2\mathcal{A} n_B$, independientemente de λ .

^{iv}Aquí, y en lo que sigue, notaremos por conveniencia la cantidad N_L de NL $n \geq 1$ completamente ocupados como $N_L = q - 1$, donde q es un entero mayor que 1. Emplearemos esta notación para que, al ordenar los niveles de energía como ε_r , los primeros $r = 1, 2, \dots, q - 1$ están completamente llenos, y el último nivel parcialmente ocupado es con $r = q$, i.e. ε_q .

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

La magnetización en el estado fundamental, para N constante, se calcula como $M = -\mathcal{A}^{-1}(\partial U/\partial B)_N$. Teniendo en cuenta que $\partial D/\partial B = D/B$ y $\partial\theta/\partial B = -N/DB$, de la ec. (4.3) obtenemos

$$M = \frac{1}{B} \left(n_e \varepsilon_q - \frac{U}{\mathcal{A}} - \frac{U^\partial}{\mathcal{A}} \right), \quad (4.4)$$

donde definimos

$$U^\partial = \sum_{r=1}^{q-1} D \frac{\partial \varepsilon_r}{\partial B} + D\theta \frac{\partial \varepsilon_q}{\partial B}. \quad (4.5)$$

La expresión de M , ec. (4.4), nos indica que al variar B la magnetización oscila de manera discontinua. Esto se debe a saltos discontinuos en ε_q o U^∂ , siendo la energía interna U siempre una función continua. Las discontinuidades producidas por ε_q ocurren siempre que q cambia, al variar el campo B o la densidad electrónica n_e . Así, cuando se produce un cambio $q \rightarrow q-1$ (lo cual implica que el campo B aumenta), las discontinuidades ΔM son en general

$$\Delta M_{q \rightarrow q-1} = \frac{n_e}{B} \Delta \varepsilon_q, \quad (4.6)$$

donde

$$\Delta \varepsilon_q = \varepsilon_q - \varepsilon_{q-1}. \quad (4.7)$$

El otro tipo de discontinuidad que puede producirse en M es debida al término U^∂ . Como se verá en detalle más adelante, este tipo de discontinuidad solo aparece en presencia de niveles de energía que no tienen un orden específico. En otras palabras, el término U^∂ es discontinuo cuando existe una variación en el orden los niveles de energía, sin que haya un cambio en q . En consecuencia, el análisis de las discontinuidades causadas por U^∂ será postergado a los casos donde ocurren.

4.1.2.2. Oscilaciones magnéticas

A continuación analizaremos, de manera general, las características de las OM asociadas a los saltos discontinuos en ε_q al variar q , donde las discontinuidades en M están dadas por la ec. (4.6). La expresión y orden de estas discontinuidades dependen, naturalmente, de cómo están ordenados los niveles de energía, lo cual solo puede explicitarse para cada caso en particular. Aún así es posible realizar una descripción general asumiendo la existencia de un ordenamiento. Suponer entonces, de manera general, que para un dado material 2D el ordenamiento de los niveles de energía es conocido. En otras palabras, para los niveles de Landau $\varepsilon_{n;\gamma}$ definidos en la sección 4.1.1, n_r y γ_r son funciones conocidas del parámetro de ordenamiento r . En particular, nos interesa el cambio en estos índices en la última posición ocupada, lo cual denotamos como Δ_q . En general $\Delta q = \{\Delta n_q; \Delta \gamma_q\} = \{n_q - n_{q-1}; \gamma_q - \gamma_{q-1}\}$ para todos los índices presentes. Ahora bien, asumiendo un ordenamiento tal que Δq se

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

repite cada ℓ cambios en q , entonces existen ℓ tipos de discontinuidades en M , los cuales denotamos como $i = 1, 2, \dots, \ell$. El pico i ocurre cuando q toma valores $\{i, \ell + i, 2\ell + i, \dots\}$, y si $\{\Delta_n^i; \Delta_\gamma^i\}$ son los correspondientes cambios en los índices, luego el cambio en el último nivel de energía es

$$\Delta\varepsilon_i = \varepsilon_{n_q; \gamma_q} - \varepsilon_{n_q - \Delta_n^i; \gamma_q - \Delta_\gamma^i}. \quad (4.8)$$

Cada pico i produce una discontinuidad en la magnetización con amplitud

$$A_i = \frac{n_e}{B} \Delta\varepsilon_i. \quad (4.9)$$

Estas discontinuidades dan lugar, como término dominante, a una oscilación tipo *diente de sierra* (SO: *sawtooth oscillation*) en las OM en el estado fundamental (sección 2.1.3). Para cada pico i , el correspondiente periodo se puede determinar considerando que ocurre cuando q toma valores $\{i, \ell + i, 2\ell + i, \dots\}$, es decir, si $q/\ell - i/\ell$ es un entero. Luego, identificando $(q - 1) \rightarrow (\nu - 2)/\lambda$ (ec. (4.1), de manera general para todo campo magnético), las SO resultan

$$M_{SO,i} = A_i \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi p} \text{sen}(2\pi p \psi_i), \quad (4.10)$$

donde

$$\psi_i = \frac{n_e \phi}{\lambda B \ell} - \frac{1}{\ell} \left(i + \frac{2}{\lambda} - 1 \right). \quad (4.11)$$

El término ψ_i puede considerarse la fase de las OM. Notar que efectivamente el pico i ocurre cuando $\psi_i = n \in \mathbb{N}$, lo cual implica $q = \{i, \ell + i, 2\ell + i, \dots\}$. Las SO totales son $M_{SO} = \sum_{i=1}^{\ell} M_{SO,i}$. La siguiente contribución a las OM está dado por un término cosenoidal, como se obtuvo en la ec. (2.20). Esta oscilación continua se puede obtener fácilmente notando que, para las partes oscilantes de M y U , se tiene $M_{osc} = -\mathcal{A}^{-1} (\partial U_{osc} / \partial B)_N$. Esto implica que, de acuerdo a la ec. (4.10), el primer término en la serie de $U_{osc,i}$ debería ser de la forma

$$U_{osc,i} = C_i \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{(\pi p)^2} \cos(2\pi p \psi_i), \quad (4.12)$$

donde C_i satisface $M_{osc} = -\mathcal{A}^{-1} (\partial U_{osc} / \partial B)_N$, por lo que $2C_i (\partial \psi_i / \partial B) = \mathcal{A} A_i$. Luego obtenemos la expresión para las OM

$$M_{osc,i} = M_{SO,i} + A_{cos,i} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{(\pi p)^2} \cos(2\pi p \psi_i), \quad (4.13)$$

donde

$$A_{cos,i} = \frac{1}{2\psi_i^{(1)}} \left[A_i \frac{\psi_i^{(2)}}{\psi_i^{(1)}} - \left(\frac{\partial A_i}{\partial B} \right) \right], \quad (4.14)$$

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

donde denotamos $\psi_i^{(n)} = \partial^n \psi_i / \partial B^n$ la derivada de orden n de ψ_i respecto de B . Las OM totales son $M_{osc} = \sum_{i=1}^{\ell} M_{osc,i}$. Vale notar que en la práctica es buena aproximación considerar que las OM, en el estado fundamental, están dadas simplemente por el término dominante M_{SO} . Esto es particularmente cierto cuando $\psi_i \gg 1$, lo cual implica $n_e \phi / B \gg 1$, es decir que muchos niveles están ocupados ($q \gg 1$). En efecto, teniendo en cuenta que $\partial A_i / \partial B$ suele ser despreciable aún si A_i depende de B (ver secciones que siguen), y que $\psi_i^{(n)} \sim \psi / B^n$ [ver ec. (4.11)], luego la relación entre la amplitud de las series seno y coseno en $M_{osc,i}$ es

$$\left| \frac{A_{cos,i}}{A_i} \right| \simeq \frac{1}{\psi_i}. \quad (4.15)$$

Por lo tanto si $\psi_i \gg 1$ podemos despreciar la serie coseno en la ec. (4.13). Resolviendo entonces la serie seno, se obtienen las OM

$$M_{osc} = \sum_{i=1}^{\ell} \frac{A_i}{\pi} \arctan [\cot(\pi \psi_i)]. \quad (4.16)$$

Esta aproximación es válida si q no es pequeño, es decir, si la ocupación es grande. Esto implica campos magnéticos no muy grandes y densidades electrónicas relativamente altas. Como estimación, considerando como referencia $n_e \sim 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, la condición $n_e \phi / B \gg 1$ implica $B [T] \ll 40$, de manera que incluso para campos relativamente altos, la ec. (4.16) es una buena aproximación para las OM en el estado fundamental a N constante.

4.1.3. Oscilaciones magnéticas para μ constante

Para el caso de μ constante, trabajamos en el ensamble gran canónico, donde la variable fundamental es el gran potencial $\Omega = F - \mu N$ ^[154]. En concordancia con el caso N constante, consideraremos $\mu > 0$ tal que solo la banda de conducción contribuye a las OM y entonces ignoraremos la contribución de la banda de valenciaⁱ. El control de μ puede deberse a la aplicación de un *gate voltage*, al igual que el control de n_e para N constante.

4.1.3.1. Gran potencial y magnetización

Consideraremos entonces μ tal que f niveles de energía están completamente llenos. Nuevamente ignoraremos, por simplicidad, la contribución del NL $n = 0$, asumiendo valores de B y μ tal que está siempre ocupado y no contribuye a las OM. Luego, en función de los niveles de energía ordenados ε_r para los NL $n \geq 1$, el gran potencial en el estado fundamental

ⁱEstamos tomando el cero de referencia de la energía en el punto de Dirac. Esta convención se mantiene a lo largo de toda la tesis.

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

es

$$\Omega = \sum_{r=1}^f D(\varepsilon_r - \mu), \quad (4.17)$$

donde f es la última posición ocupada tal que $\varepsilon_f \leq \mu < \varepsilon_{f+1}$. Notar que, a diferencia del caso N constante, para μ constante los niveles de energía $\varepsilon_r < \mu$ están siempre completamente llenos (cada uno con D electrones). Esto se debe, naturalmente, a que no hay restricción en la cantidad de electrones. La magnetización es $M = -\mathcal{A}^{-1}(\partial\Omega/\partial B)_\mu$, de lo cual obtenemos

$$M = -\frac{\Omega}{\mathcal{A}B} - \sum_{r=1}^f \frac{D}{\mathcal{A}} \frac{\partial\varepsilon_r}{\partial B}, \quad (4.18)$$

donde se utilizó $\partial D/\partial B = D/B$. Puesto que Ω es siempre una función continua, las discontinuidades en M a μ constante se producen solo debido al último término en la anterior ecuación. Si f cambia a $f+1$ (lo cual implica que B decrece), el salto discontinuo en M es

$$\Delta M_{f \rightarrow f+1} = -\frac{D}{\mathcal{A}} \frac{\partial\varepsilon_{f+1}}{\partial B}(B_f), \quad (4.19)$$

donde B_f es el campo magnético para el cual se produce el cambio en f , determinado por $\varepsilon_{f+1}(B_f) = \mu$. La ec. (4.19) da la amplitud de las SO en la magnetización a μ constante. El signo menos en ΔM nos dice que la magnetización decrece al aumentar la cantidad de estados ocupados, dada la suposición inicial $f \rightarrow f+1$.

4.1.3.2. Oscilaciones magnéticas

En lo que sigue obtendremos expresiones para las OM, teniendo en cuenta la amplitud de las discontinuidades en M a μ constante. La expresión de estas discontinuidades depende del sistema particular, de la misma manera que sucede en el caso N constante. Sin embargo, a diferencia de lo que ocurre a N constante, para μ constante no es necesario ordenar los niveles de energía para explicar las OM. En cambio, el valor fijo del potencial químico μ actúa de manera natural como el parámetro de ordenamiento, puesto que las OM ocurren siempre que $\varepsilon_{n;\gamma} = \mu$. Por lo tanto resulta conveniente separar los picos en las magnetización de acuerdo a los índices γ , definidos en la sección 4.1.1, considerando cada pico causado por el cambio en el NL n . En otras palabras, para cada uno de los índices γ , consideramos los picos en la magnetización (discontinuidades) debidas al cambio de NL. Para ver cómo funciona esto, considerar en general el pico que ocurre cuando $\varepsilon_{n;\gamma} = \mu$, para cada índice γ . Luego uno puede resolver $\varepsilon_{n;\gamma} = \mu$ para n , obteniendo en general

$$\varepsilon_{n;\gamma} = \mu \longrightarrow n = \psi_\gamma(\mu, B, X). \quad (4.20)$$

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

La función ψ_γ depende de μ y de los niveles de energía, pero en cualquier caso ψ_γ determina cuándo ocurren los picos: si $\psi_\gamma = n$ con $n \in \mathbb{N}$. La correspondiente amplitud A_γ de las oscilaciones *diente de sierra* (SO) en las OM está dada por la ec. (4.19), que en función de ψ_γ se puede escribir como

$$A_\gamma = -\frac{D}{\mathcal{A}} \frac{\partial \varepsilon_{n;\gamma}}{\partial B} \Big|_{n=\psi_\gamma}. \quad (4.21)$$

Luego, las SO asociadas a cada índice γ resultan

$$M_{SO,\gamma} = A_\gamma \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi p} \sin(2\pi p \psi_\gamma). \quad (4.22)$$

La ec. (4.22) da, para cada índice γ , la contribución de las oscilaciones *diente de sierra* a las OM. La siguiente contribución oscilatoria se puede obtener de la misma manera que se hizo en el caso N constante. Es decir, sabiendo que Ω_{osc} oscila de manera continua, y que $M_{osc} = -\mathcal{A}^{-1} (\partial \Omega_{osc} / \partial B)_\mu$, entonces el primer término en la serie de Ω_{osc} es de la forma

$$\Omega_{osc,\gamma} = C_\gamma \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{(\pi p)^2} \cos(2\pi p \psi_\gamma), \quad (4.23)$$

donde C_γ satisface $M_{osc} = -\mathcal{A}^{-1} (\partial \Omega_{osc} / \partial B)_\mu$ de forma que $2C_\gamma (\partial \psi_\gamma / \partial B) = \mathcal{A} A_\gamma$. Por lo tanto las OM para μ constante quedan

$$M_{osc,\gamma} = M_{SO,\gamma} + A_{cos,\gamma} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{(\pi p)^2} \cos(2\pi p \psi_\gamma), \quad (4.24)$$

donde

$$A_{cos,\gamma} = \frac{1}{2\psi_\gamma^{(1)}} \left[A_\gamma \frac{\psi_\gamma^{(2)}}{\psi_\gamma^{(1)}} - \left(\frac{\partial A_\gamma}{\partial B} \right) \right]. \quad (4.25)$$

Las OM totales son $M_{osc} = \sum_\gamma M_{osc,\gamma}$. La expresión general (4.24) es completamente análoga a la expresión para las OM en el caso N constante [ec. (4.13)], con la diferencia de sumar sobre los índices γ en vez del índice ℓ . Sin embargo, esto es una analogía solo en la forma matemática de las expresiones, puesto que como veremos más adelante, existen importantes diferencias en cuanto las fases ψ_i y ψ_ℓ en cada caso. Aún así, la analogía formal de las expresiones como función de la fase ψ permite el mismo tipo de aproximación a las OM en el caso de alta ocupación, tal que $\psi_\gamma \gg 1$. En efecto, considerando que $\partial A_\gamma / \partial B$ suele ser despreciable si A_γ depende de B , de las ec. (4.21) y (4.25) se obtiene

$$\left| \frac{A_{cos,\gamma}}{A_\gamma} \right| \simeq \frac{1}{\psi_\gamma}. \quad (4.26)$$

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

Luego si $\psi_\gamma \gg 1$ podemos despreciar la serie coseno en la ec. (4.24) y entonces

$$M_{osc} = \sum_{\gamma} \frac{A_{\gamma}}{\pi} \arctan [\cot (\pi \psi_{\gamma})]. \quad (4.27)$$

Para cada índice γ , esta aproximación es válida solo si ψ_γ no es pequeño. Esto, a diferencia del caso N constante (donde la ec. (4.16) es válida si la ocupación q es grande, lo cual solo depende del campo magnético y la densidad electrónica), depende en general del valor de μ y de la expresión particular de los niveles de energía $\varepsilon_{n;\gamma}$. Sin embargo, dado que en todos los casos $\varepsilon_{n;\gamma}$ aumenta con el campo B , la condición $\psi_\gamma \gg 1$ en general requiere campos relativamente bajos (digamos $B < 10$ T), y potenciales químicos μ relativamente altos (alrededor de $\mu \sim 10^{-1}$ eV). De todos modos vale decir que, a fines prácticos, en los casos de interés donde estudiaremos las OM, la validez de $\psi_i \gg 1$ implica $\psi_\gamma \gg 1$ y viceversa.

4.2. Grafeno

Como fue obtenido en la sección 3.1.6, en un campo magnético perpendicular B los niveles de energía para la banda de conducción, incluyendo el efecto Zeeman, son

$$\varepsilon_{n,s} = \alpha \sqrt{Bn} - s\mu_B B. \quad (4.28)$$

donde $\alpha = v_F \sqrt{2e\hbar}$, $n = 0, 1, 2, \dots$ es el índice de Landau, y consideramos $g = 2$ para el factor-g en grafeno. En el formalismo de la sección 4.1.1, existe un solo índice $\gamma = s = \pm 1$ (espín), y ninguna otra variable $X = 0$. Los NL no dependen del valle, de manera que existe una doble degeneración de valle. Luego la degeneración de cada nivel de energía (con NL $n \geq 1$) es $D = 2AB/\phi$, donde $\phi = h/e$ es el flujo magnético unidad.

4.2.1. Oscilaciones magnéticas para N constante

Siguiendo el formalismo de la sección 4.1.2, la degeneración adicional debido al valle es $\lambda = 2$. Por lo tanto, de la ec. (4.1), en el estado fundamental el número de niveles de energía con NL $n \geq 1$ totalmente llenos es

$$q - 1 = \text{floor} \left[\frac{\nu}{2} - 1 \right], \quad (4.29)$$

donde $\nu = n_e \phi / B$. Esto implica que existe un cambio de nivel de energía para factor de llenado $\nu = 2q = 2, 4, 6, \dots$. Por otro lado, de la ec. (4.2), la ocupación parcial del último nivel de energía resulta $\theta = \nu/2 - \text{floor} [\nu/2]$.

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

Para considerar el ordenamiento de los niveles de energía (4.28), tenemos que considerar que podría haber una mezcla de los espines si el desdoblamiento de los niveles de energía es tal que para un dado nivel de Landau n se tiene $\varepsilon_{n+1,+} < \varepsilon_{n,-}$, lo cual implicaría que los estados con energía $\varepsilon_{n+1,+}$ se llenan antes que los estados con energía $\varepsilon_{n,-}$. Esto sucedería si $\alpha\sqrt{B}(\sqrt{n+1} - \sqrt{n}) < 2\mu_B B$. Así, para q niveles llenos, considerando que cada nivel puede ser ocupado con espín up o down, la condición para la cual el mezclado de espín empieza se puede aproximar como

$$\alpha\sqrt{B}\left(\sqrt{\frac{q}{2}} - \sqrt{\frac{q}{2} - 1}\right) < 2\mu_B B. \quad (4.30)$$

En consecuencia, la condición de mezclado de espín depende de la densidad electrónica n_e y el campo magnético B . Esto es debido a que los NL no son equidistantes, de manera que la relación entre la energía de Zeeman y la separación de los NL depende naturalmente de cuál es el último NL ocupadoⁱ. Sin embargo, es fácil verificar que para campos magnéticos usuales, la ec. (4.30) se satisface solo para densidades electrónicas mucho más grandes que las que satisfacen la aproximación de onda larga^[16,82]. En otras palabras, para las densidades electrónicas que satisfacen la ec. (4.30), la energía de Fermi ε_F asociada no satisface $\varepsilon_F \ll t$ (donde $t \sim 3$ eV es la integral de solapamiento). En consecuencia podemos decir que no hay mezcla de espín dentro de la aproximación de onda larga en grafeno. Por lo tanto el ordenamiento de los niveles de energía es tal que los valores $\nu = 2, 6, 10, \dots$ corresponde a un cambio de NL, mientras que los valores $\nu = 4, 8, 12, \dots$ corresponden a un cambio de espín en el mismo NL.

De esta manera, los niveles de energía ordenados en grafeno pueden escribirse

$$\varepsilon_r = \alpha\sqrt{Bn_r} - s_r\mu_B B \quad (4.31)$$

$$n_r = \text{floor}\left[\frac{r+1}{2}\right] \quad (4.32)$$

$$s_r = (-1)^{r+1}, \quad (4.33)$$

donde $r = 1, 2, 3, \dots$ es el parámetro de ordenamiento. Puesto que existe un ordenamiento fijo, la energía U^∂ [ec. (4.5)] varía de manera continua (al igual que U), y las discontinuidades en la magnetización está producidas solo por los cambios discontinuos en el último nivel ocupado ε_q . Ahora bien, el ordenamiento dado de ε_r es tal que $\Delta q = \{\Delta n_q; \Delta s_q\}$ se repite cada $\ell = 2$ cambios. El pico $i = 1$ corresponde a un cambio de NL y espín ($\Delta n_q = 1$ y $\Delta s_q = 2$), que ocurre cuando $q = \{i, \ell + i, 2\ell + i, \dots\} = 1, 3, 5, \dots$ (q impar). El pico

ⁱEn un gas de electrones clásico 2D, con NL equidistantes $\varepsilon_{n,s} = aB(n+1/2) - s\mu_B B$ (siendo a una constante que depende del material), la condición de mezcla de espín es $a < 2\mu_B$, lo cual es independiente de la densidad electrónica y el campo magnético. De hecho, para electrones libres resulta $a = 2\mu_B$, lo cual implica que $\varepsilon_{n+1,+} = \varepsilon_{n,-}$. Sin embargo, en sistemas reales la masa efectiva es distinta a la masa del electrón libre (y en general el factor- g no es exactamente $g = 2$), con lo cual $a \neq 2\mu_B$.

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

$i = 2$ corresponde a solo un cambio de espín ($\Delta n_q = 0$ y $\Delta s_q = -2$), que ocurre cuando $q = \{i, \ell + i, 2\ell + i, \dots\} = 2, 4, 6, \dots$ (q par). Teniendo en cuenta la ec. (4.31), los cambios de energía en cada caso son

$$\Delta\varepsilon_1 = \alpha\sqrt{B} \left(\sqrt{\frac{q+1}{2}} - \sqrt{\frac{q-1}{2}} \right) - 2\mu_B B \quad (4.34)$$

$$\Delta\varepsilon_2 = 2\mu_B B. \quad (4.35)$$

Reemplazando $q = \nu/2$ [ec. (4.29)], de la ec. (4.9) se obtienen las amplitudes de las discontinuidades en la magnetización

$$A_{LS} = \frac{\alpha n_e}{2B^{1/2}} \left(\sqrt{\nu+2} - \sqrt{\nu-2} \right) - 2n_e\mu_B \quad (4.36)$$

$$A_S = 2n_e\mu_B, \quad (4.37)$$

donde notamos LS para el pico $i = 1$ y S para el pico $i = 2$, a fin de indicar que las discontinuidades corresponden a un cambio de NL y/o espín en cada caso. La correspondiente fase de las OM, ec. (4.11), resulta ($\ell = 2$ y $\lambda = 2$, con $i = 1$ para A_{LS} y $i = 2$ para A_S)

$$\psi_{LS} = \frac{n_e\phi}{4B} - \frac{1}{2} \quad (4.38)$$

$$\psi_S = \frac{n_e\phi}{4B}. \quad (4.39)$$

Notar que estas fases efectivamente implican que los picos LS ocurren cuando $\nu = 2(2n+1)$ y los picos S cuando $\nu = 4n$, con $n \geq 1$ un entero. La contribución de las SO a las OM es

$$M_{SO} = A_{LS} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi p} \operatorname{sen} \left[2\pi p \left(\frac{n_e\phi}{4B} - \frac{1}{2} \right) \right] + A_S \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi p} \operatorname{sen} \left(2\pi p \frac{n_e\phi}{4B} \right). \quad (4.40)$$

De la ec. (4.14) obtenemos las amplitudes de la serie coseno en las OMⁱ

$$A_{LS}^{cos} = \frac{4B}{n_e\phi} \left[A_{LS} + \frac{B}{2} \left(\frac{\partial A_{LS}}{\partial B} \right) \right] \quad (4.41)$$

$$A_S^{cos} = \frac{4B}{n_e\phi} A_S, \quad (4.42)$$

donde

$$\left(\frac{\partial A_{LS}}{\partial B} \right) = \frac{1}{2B} A_L \left(\frac{\nu}{\sqrt{\nu^2 - 4}} - 1 \right), \quad (4.43)$$

ⁱPara asegurar la continuidad de la relación $M_{osc} = -\mathcal{A}^{-1} (\partial U_{osc} / \partial B)_N$ para cualquier campo magnético, en la ec. (4.36) debe tratarse al factor de llenado $\nu = n_e\phi/B$ como función de B , considerando entonces $\partial\nu/\partial B = -\nu/B$.

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

donde $A_L = A_{LS} + A_S$ es la amplitud de las discontinuidades en la magnetización debido solo al cambio de NL. Notar que si la ocupación es alta $\nu \gg 1$ se tiene $\partial A_{LS}/\partial B \rightarrow 0$ y entonces $A_{LS}^{cos} \simeq 4BA_{LS}/n_e\phi = 4A_{LS}/\nu$, que es la misma relación que existe para A_S^{cos} y A_S . En tal caso, como $\nu \gg 1$, se tiene $|A_i^{cos}/A_i| \ll 1$ y la serie coseno se puede despreciar. Finalmente, las OM en el estado fundamental quedan

$$M_{osc} = M_{SO} + A_{LS}^{cos} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{(\pi p)^2} \cos \left[2\pi p \left(\frac{n_e\phi}{4B} - \frac{1}{2} \right) \right] + A_{LS}^{cos} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{(\pi p)^2} \cos \left(2\pi p \frac{n_e\phi}{4B} \right). \quad (4.44)$$

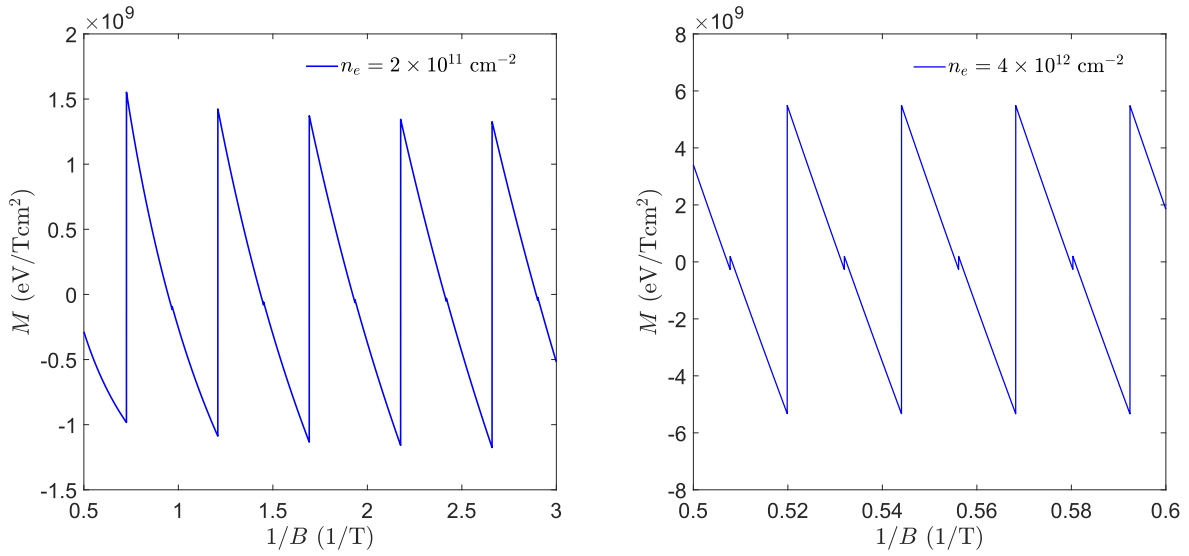


Figura 4.1: Oscilaciones magnéticas dadas por la ec. (4.44), en función de $1/B$, para los casos de densidad electrónica n_e baja y alta.

En la Fig. 4.1 se muestran las OM dadas por la ec. (4.44), como función de B^{-1} , considerando los casos de densidad electrónica baja y alta. En el primer caso, $n_e = 2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, prácticamente solo se observa el pico LS, con amplitud A_{LS} , aunque es posible discernir la pequeña discontinuidad que aparece debido al pico S, con amplitud A_S . Es decir, para esta densidad electrónica se tiene $A_{LS} \gg A_S$, y uno bien podría directamente obviar el DE de los NL. Esto cambia al considerar mayores densidad electrónicas, como se observa en la figura de la derecha, para $n_e = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Allí se ve más claramente la contribución del DE a las OM, con los picos de amplitud A_S que aparecen entre los picos LS. Así vemos que la amplitud relativa de las OM depende fuertemente de la densidad electrónica del sistema.

Otra cuestión que se puede observar en la Fig. 4.1 es cómo cambia el perfil de las OM al aumentar ν . En particular, vemos que cuando n_e es pequeña, a campos magnéticos altos (bajo B^{-1}) existe una pequeña curvatura en las OM, la cual progresivamente desaparece al aumentar ν . Este comportamiento es debido a la serie coseno en la ec. (4.40), cuya contri-

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

bución oscilatoria (que es continua) se refleja en un cambio de curvatura en M_{osc} . En otras palabras, el efecto de la serie coseno en la ec. (4.40) es cambiar la curvatura de las SO. Notar que este efecto no se observa a densidades electrónicas altas (figura derecha), donde las OM son prácticamente SO. Como ya se observó anteriormente, este comportamiento se debe a que al aumentar la densidad electrónica aumenta la ocupación de los NL ($\nu \gg 1$), en cuyo caso $|A_i^{cos}/A_i| \ll 1$, y las OM en el estado fundamental se reducen a una simple SO. Luego, resolviendo la serie (4.40), para $\nu \gg 1$ resulta

$$M_{osc} \simeq \frac{A_{LS}}{\pi} \arctan \left\{ \cot \left[\pi \left(\frac{n_e \phi}{4B} - \frac{1}{2} \right) \right] \right\} + \frac{A_S}{\pi} \arctan \left[\cot \left(\pi \frac{n_e \phi}{4B} \right) \right]. \quad (4.45)$$

4.2.1.1. Efecto del desdoblamiento de espín

En primer lugar, conviene primero analizar las OM sin DE, lo cual se realiza considerando $\mu_B \rightarrow 0$ en las ecuaciones previas. En tal caso $A_S = 0$ y las únicas discontinuidades en las magnetización son debidas al cambio de NL. La amplitud A_L de estos cambios está dada por la ec. (4.36), con $A_S = 0$, lo cual implica

$$A_L = \frac{\alpha n_e}{2B^{1/2}} \left(\sqrt{\nu + 2} - \sqrt{\nu - 2} \right). \quad (4.46)$$

Esto corresponde al cambio de NL en el último nivel ocupado. Es interesante notar que esta expresión difiere significativamente con la esperada para un gas de electrones 2D clásicos (2DEG), como ocurren por ejemplo en las heteroestructuras GaAs. En efecto, para NL clásicos del tipo $\varepsilon_n = aB(n + 1/2)$, simplemente se tiene $A_L^{clásico} = an_e$. Es decir, en un sistema 2D clásico la amplitud de las OM no depende del campo magnético ni del factor de llenado ν de los NL. En contraste, la expresión (4.46) para el grafeno depende tanto de B como ν . Esta dependencia es especialmente pronunciada para bajos factores de llenado. En el caso de ν relativamente alto, tal que $\sqrt{\nu/2 + 1} - \sqrt{\nu/2 - 1} \sim \sqrt{2/\nu}$, se tiene $A_L \simeq \alpha \sqrt{n_e/\phi}$. Cabe destacar que, en general, la expresión (4.46) también puede escribirse en función de la diferencia del nivel de NL que corresponde a la amplitud A_L . Es decir, para un salto del último NL ocupado ($n - 1$) al siguiente n (o viceversa), la discontinuidad en la magnetización es

$$A_L^{(n-1) \rightarrow n} = \frac{n_e}{B} \left[\alpha \sqrt{Bn} - \alpha \sqrt{B(n-1)} \right]. \quad (4.47)$$

Ahora consideremos el efecto que tiene el DE en las OM. Como ya se ha mencionado, en grafeno, debido a la alta frecuencia de ciclotrón de los NL, el DE es en general relativamente pequeño (es decir $\Delta\varepsilon_L \gg 2\mu_B B$). Esto implica que en la mayoría de los casos es factible directamente despreciar al DE, si uno no se encuentra en situaciones extremas (i.e. campos B muy grandes), o situaciones donde el espín en sí es el factor de estudio. El caso de las OM es peculiar puesto que, en el estado fundamental, las oscilaciones se manifiestan de manera

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

discontinua. Esto quiere decir que, por más pequeño que sea el DE de un NL, su efecto dará lugar a una discontinuidad en la magnetización al variar el campo magnético. Como una discontinuidad es un cambio abrupto, el efecto puede decirse que se magnifica.

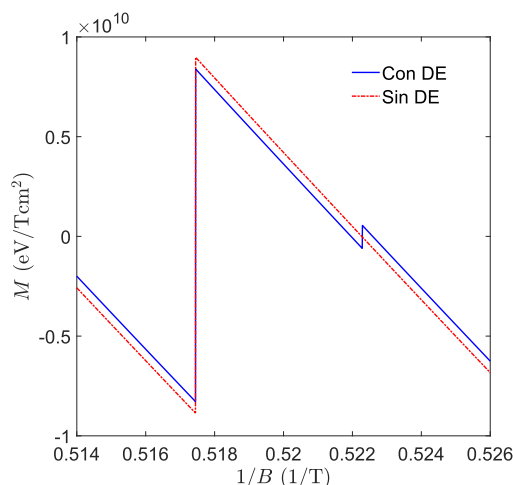


Figura 4.2: Magnetización en grafeno, con y sin DE (efecto Zeeman), para $n_e = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$.

Para dar una idea gráfica de cómo afecta el DE a las OM, en la Fig. 4.2 graficamos la magnetización para una densidad electrónica alta $n_e = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ (para magnificar el efecto del DE), considerando las situaciones con DE y sin DE (tomando $\mu_B \rightarrow 0$). Debido al DE se aprecian dos efectos: uno es la aparición de discontinuidades en M en valores $\nu = 4n$, con amplitud $A_S = 2n_e\mu_B$, y la otra es la reducción de las discontinuidades en M en valores $\nu = 2(2n + 1)$. Ya sabemos que sin DE la amplitud de las OM es A_L [ec. (4.46)]. Con DE, dicha amplitud pasa a ser $A_{LS} = A_L - A_S$. Así, puede pensarse que los nuevos picos debidos solo al cambio de espín, con amplitud A_S , provienen de una disminución de la amplitud de los picos debido al cambio de NL. En otras palabras, el DE reduce los picos A_L en la misma magnitud que incrementa los nuevos picos A_S . Este comportamiento, de tipo conservativo, no es más que un reflejo de la conservación de la cantidad de electrones. Otro punto a tener en cuenta es que, al considerar el DE, todo cambio en q (en el último nivel ocupado) implica un cambio de espín: de espín up a down cuando solo hay cambio de espín y se producen los picos con amplitud A_S , y de espín down a up cuando a su vez hay cambio de NL y se producen los picos con amplitud A_{LS} .

4.2.1.2. Amplitud de las oscilaciones

La magnitud de los picos A_S depende linealmente con la densidad electrónica n_e , lo cual implica que la observación del DE en las OM depende de cómo es el dopaje en grafeno. Esta dependencia ya se observó en la Fig. 4.1, donde se ve que el efecto del DE incrementa

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

al aumentar n_e . Una medida de este efecto se obtiene al considerar la relación entre las amplitudes A_{LS} y A_S . Dicha relación depende no solo de la densidad electrónica, sino también de las escalas de energía $\Delta\varepsilon_L$ y $2B\mu_B$ de los cambios de NL y espín, respectivamente. Debido a la peculiaridad de los NL en grafeno, esta diferencia depende a su vez del llenado de los niveles de energía. En efecto, tomando el cociente entre A_{LS} y A_S se tiene

$$\frac{A_{LS}}{A_S} = \frac{\alpha}{4\mu_B B^{1/2}} \left(\sqrt{\nu + 2} - \sqrt{\nu - 2} \right) - 1. \quad (4.48)$$

Así vemos que la relación entre A_{LS} y A_S depende de B y n_e . En comparación, en un 2DEG, siendo $A_L = an_e$ (ver discusión arriba), se tiene $A_{LS}/A_S = a/2\mu_B - 1$, independiente de B y n_e . En tal caso, si $a \gg 2\mu_B$ entonces el DE es siempre despreciable. En contraste, en grafeno el DE es, en general, despreciable o no dependiendo del valor de B y n_e .

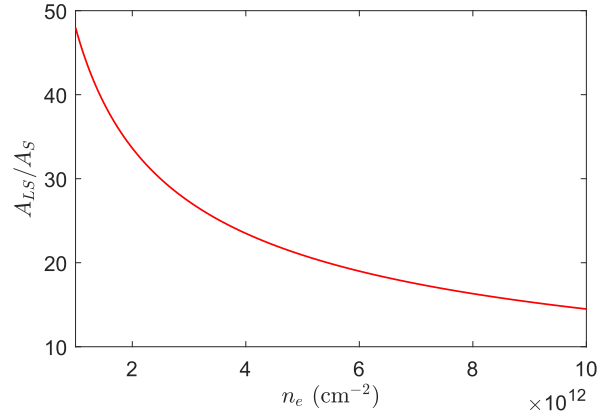


Figura 4.3: Relación A_{LS}/A_S entre los picos LS y S en las OM, en función de la densidad electrónica n_e , para un factor de llenado $\nu = n_e\phi/B = 10$.

En la Fig. 4.3 se muestra A_{LS}/A_S en función de la densidad electrónica n_e , para un factor de llenado $\nu = n_e\phi/B = 10$. Se ve entonces que la relación entre A_{LS} y A_S depende fuertemente de n_e . Para densidades electrónicas $n_e \simeq 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ se tiene $A_{LS} \gg A_S$, en cuyo caso el DE se puede prácticamente despreciar, como en general se ha hecho al estudiar las OM en grafeno^[86,91]. Sin embargo, al aumentar n_e la relación entre A_{LS}/A_S disminuye, y entonces el efecto del DE se vuelve cada vez más apreciable. Cabe destacar que para ν suficiente alto, tal que $A_L \simeq \alpha\sqrt{n_e/\phi}$, la relación entre A_{LS} y A_S resulta

$$\frac{A_{LS}}{A_S} \simeq \frac{\alpha}{2\mu_B} \frac{1}{\sqrt{n_e\phi}} - 1. \quad (4.49)$$

Así, el efecto relativo del DE en las OM depende solo de la densidad electrónica n_e , y las propiedades del material. La dependencia del tipo $n_e^{-1/2}$ de A_{LS}/A_S con la densidad

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

electrónica, como se observa en la Fig. 4.3, es característica de los NL relativistas y no equidistantes en grafeno.

4.2.2. Oscilaciones magnéticas para μ constante

De acuerdo al formalismo de la sección 4.1.1, los niveles de energía (4.28) en grafeno tienen un solo índice $\gamma = s$, y ninguna variable extra además del campo magnético (i.e. $X = 0$). La fase ψ_s de las OM a μ constante se determina por la condición (4.20). Resolviendo $\mu = \alpha\sqrt{Bn} - s\mu_B B$ para n se obtiene $n = B^{-1}(\mu + s\mu_B B)^2 / \alpha^2$. Por lo tanto

$$\psi_s = \frac{1}{B} \left(\frac{\mu + s\mu_B B}{\alpha} \right)^2 \simeq \frac{\mu^2}{\alpha^2} \left(\frac{1}{B} + \frac{2s\mu_B}{\mu} \right), \quad (4.50)$$

donde en el último paso aproximamos $\mu_B B / \mu \ll 1$, como sucede usualmente. De esta manera, las OM a μ constante son periódicas en B^{-1} , al igual que sucede en el caso N constante. Sin embargo, la fase de las oscilaciones, para cada espín, es diferente. En efecto, los campos en los cuales ocurren las OM (discontinuidades en el estado fundamental) se dan cuando $\psi_s = n$, con n un entero positivo. Por lo tanto, despejando B de $\psi_s = n$, se obtiene que de los picos de magnetización ocurren para campos

$$\frac{1}{B_{n,s}} = \frac{n}{\omega} - \Delta_s, \quad (4.51)$$

donde ω y Δ_s son la frecuencia y fase de las oscilaciones, con expresión

$$\omega = \left(\frac{\mu}{\alpha} \right)^2 \quad (4.52)$$

$$\Delta_s = \frac{2s\mu_B}{\mu}. \quad (4.53)$$

Notar que $\omega = [\Delta(1/B)]^{-1}$, donde $\Delta(1/B) = 1/B_{n+1,s} - 1/B_{n,s}$ es el periodo de las OM para el espín s . Esta frecuencia es la misma para cada espín ya que la dependencia de los niveles de energía con s es solo a través del efecto Zeeman, que es independiente del NL. La diferencia entre las OM para cada espín está entonces dada solo por la fase relativa Δ_s que sí depende de s . Específicamente, los picos están desfasados $|2\Delta_s| = 4\mu_B/\mu$, y como en general $|2\Delta_s\omega| \ll 1$, el resultado es dos OM para cada espín con un pequeño desfase entre sí que es mucho menor que el periodo de las oscilaciones. Este comportamiento resulta en la observación de una pequeña discontinuidad debida al DE, de manera similar a lo que sucede en el caso N constante. En función de la frecuencia y la fase $\Delta_s = s\Delta$, donde definimos

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

$\Delta \equiv 2\mu_B/\mu$, la fase total ψ_s puede escribirse

$$\psi_s = \omega \left(\frac{1}{B} + s\Delta \right). \quad (4.54)$$

Las amplitudes de las OM, para cada espín, se obtienen de la ec. (4.21), con la degeneración $D = 2\mathcal{A}B\phi$. En grafeno, para los niveles de energía (4.28) se tiene

$$\frac{\partial \varepsilon_{n,s}}{\partial B} = \frac{\alpha}{2} \sqrt{\frac{n}{B}} - s\mu_B = \frac{1}{2B} (\varepsilon_{n,s} - s\mu_B B). \quad (4.55)$$

Por lo tanto, como $\varepsilon_{n,s} = \mu$ cuando $n = \psi_s$, la amplitud de las OM es

$$A_s = -\frac{1}{\phi} (\mu - s\mu_B B). \quad (4.56)$$

Esta amplitud da las discontinuidades de las OM en el caso μ constante. Notar la diferencia que existe con la amplitud de las discontinuidades en las OM para N constante [ec. (4.36) y (4.37)]. Mientras que para N constante la amplitud depende, en general, del factor de llenado, para μ constante vemos que la situación se simplifica considerablemente. La amplitud A_s depende solo del potencial químico μ (igual a la energía de Fermi en el estado fundamental), y el DE de los niveles de energía.

Teniendo la amplitud y la fase de las OM, la contribución SO a las OM, ec. (4.22), resulta

$$M_{SO} = \sum_{s=\pm 1} A_s \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi p} \text{sen} \left[2\pi p \omega \left(\frac{1}{B} + s\Delta \right) \right]. \quad (4.57)$$

Las amplitudes de la siguiente contribución a las OM, dada por la serie coseno, se determinan con la ec. (4.25). Teniendo en cuenta la ec. (4.56), se obtiene

$$A_s^{cos} = \frac{B}{\omega \phi} \left(-\mu + \frac{3}{2} s\mu_B B \right). \quad (4.58)$$

Finalmente, las OM a μ constante quedan entonces

$$M_{osc} = M_{SO} + \sum_{s=\pm 1} A_s^{cos} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{(\pi p)^2} \cos \left[2\pi p \omega \left(\frac{1}{B} + s\Delta \right) \right]. \quad (4.59)$$

Este resultado generaliza, teniendo en cuenta el DE, la ec. (1.6) obtenida por Sharapov *et al.* en grafeno con μ constante^[86].

En la Fig. 4.4 se muestra la magnetización dada por la ec. (4.59), como función de $1/B$, para (a) bajo μ y (b) alto μ (lo cual viene a ser análogo a baja y alta densidad electrónica en el caso de N , Fig. 4.1). Como se observa, en el caso de μ bajo ($\mu \sim 10$ eV como orden de

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

magnitud), las OM se ven prácticamente como una única oscilación. En cambio, para μ alto el efecto del DE se ve más claramente en las OM. Este efecto se refleja de manera similar a lo que sucede en el caso N , con lo que parece ser una pequeña discontinuidad en las OM. Sin embargo, como veremos a continuación, el origen de esta discontinuidad es diferente.

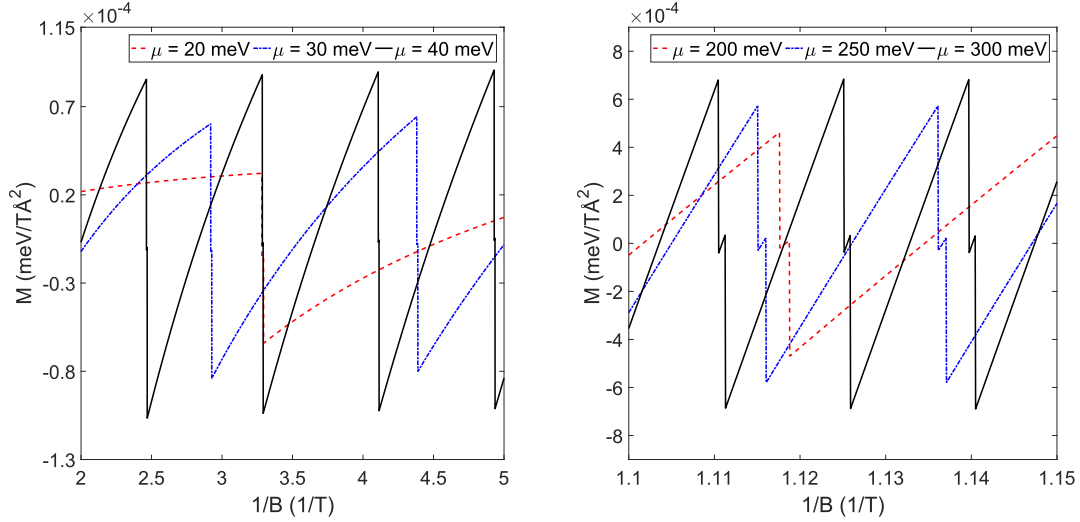


Figura 4.4: OM dadas por la ec. (4.59), como función de $1/B$, para (a) bajo μ y (b) alto μ , donde μ es la energía de Fermi.

También se puede apreciar, en la Fig. 4.4, que a bajo μ las OM presenta una pequeña curvatura, la cual desaparece a mayor μ . Al igual que en el caso N constante, esto se debe a la serie coseno en la ec. (4.59), cuya contribución es apreciable solo si la ocupación es baja (μ es pequeño). En efecto, de las ec. (4.56) y (4.58), considerando que $\mu_B B/\mu \ll 1$, se tiene $A_s^{cos}/A_s \simeq B/\omega$. Si $\mu > 0,1$ eV entonces $\omega = (\mu/\alpha)^2 > 10$ T y $A_s^{cos}/A_s < 0,1B$ [T]. Así, a no ser que B sea muy grande, tenemos $A_s^{cos}/A_s \ll 1$. Este no es el caso para valores pequeños de μ , donde incluso para valores grandes de B uno podría tener $A_s^{cos}/A_s > 1$. Esto se puede ver en la Fig. 1(a), donde para valores pequeños de μ la serie coseno en la ec. (4.59) produce una pequeña curvatura en las OM. De todas maneras, puesto que para observar el DE en las OM se requiere valores relativamente altos de μ , en lo que sigue obviaremos la contribución de la serie coseno en la ec. (4.59) y trabajaremos con las OM, en el estado fundamental, dadas por las SO de la ec. (4.45). Esta serie puede ser resultada obteniéndose

$$M_{osc} = \sum_{s=\pm 1} \frac{A_s}{\pi} \arctan \left\{ \cot \left[\pi \omega \left(\frac{1}{B} + s\Delta \right) \right] \right\}. \quad (4.60)$$

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

4.2.2.1. Efecto del desdoblamiento de espín

A continuación analizaremos en detalle la expresión (4.60), en particular el efecto del desdoblamiento de espín (DE) en las OM. Primero que nada, notar que aunque cada espín tiene diferente amplitud A_s , de la ec. (4.56) tenemos $|A_1 - A_{-1}| = \mu_B B / \phi$, lo cual en general es muy pequeño en relación a A_s . Por otro lado, como ya se mencionó, las OM son periódicas en $1/B$, cada espín con frecuencia ω pero con una diferencia de fase entre ambos de $2\Delta = 4\mu_B/\mu$. Esto nos dice que el efecto del DE en las OM depende fuertemente del valor de μ , como efectivamente se puede observar en la Fig. 4.4.

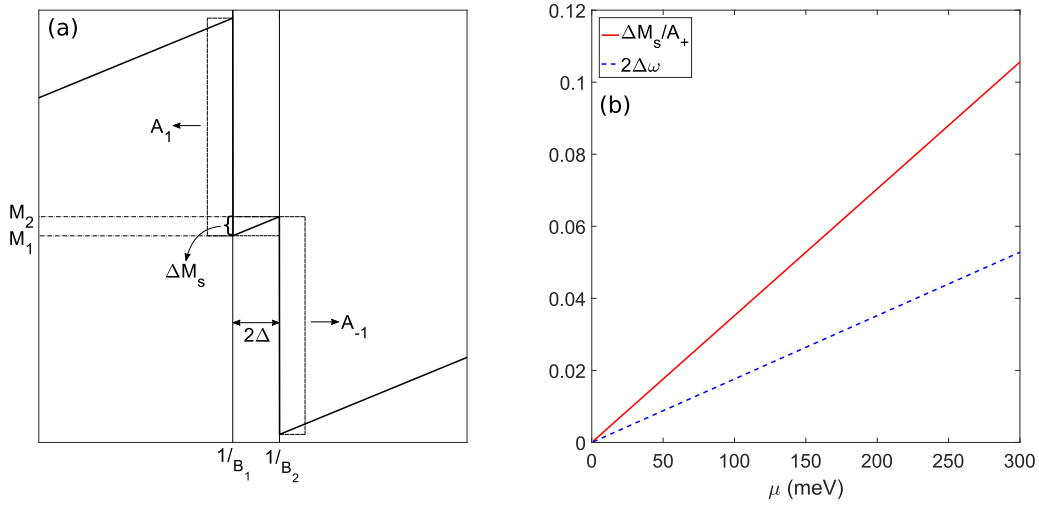


Figura 4.5: (a) Representación esquemática del efecto de DE en dos picos de OM, localizados en $1/B_1 = l/\omega - \Delta$ y $1/B_2 = l/\omega + \Delta$. El efecto del DE depende de la amplitud ΔM_s y la diferencia de fase $2\Delta = 4\mu_B/\mu$. (b) Gráfico de los parámetros $\Delta M_s/A_+$ y $2\Delta\omega$ como función de μ , donde ΔM_s está dada por la ec. (4.61) y $A_+ \equiv |A_1 + A_{-1}|/2 = \mu/\phi$. La frecuencia ω y la fase Δ están dados por las ec. (4.52) y (4.53).

A partir de la expresión (4.60) podemos calcular la magnitud del DE en las OM a μ constante, teniendo en cuenta el punto mínimo del primer pico y el punto máximo del segundo pico, como se muestra esquemáticamente en la Fig. 4.5(a). Consideramos que ambos picos corresponden a un NL n , de forma que el primer pico ocurre en $1/B = n/\omega - \Delta$, mientras en segundo pico ocurre en $1/B = n/\omega + \Delta$. Luego, de la ec. (4.60) se tiene que en el punto mínimo del primer pico la magnetización vale $M_1 = A_1/2 - A_{-1} \arctan[\cot(2\pi\omega\Delta)]/\pi$, mientras que en el punto máximo del segundo pico $M_2 = A_1 \arctan[\cot(2\pi\omega\Delta)]/\pi - A_{-1}/2$. Luego podemos decir que la amplitud ΔM_s del DE está dada por

$$\Delta M_s = A_+ \left(1 - \frac{2}{\pi} \arctan[\cot(2\pi\omega\Delta)] \right), \quad (4.61)$$

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

donde $A_+ = |A_1 + A_{-1}|/2 = \mu/\phi$. Una mejor medida de la magnitud del DE en las OM es tomar la relación entre ΔM_s y la amplitud de cada pico de espín, la cual puede aproximarse como A_+ , puesto que $A_1 \simeq A_{-1}$. Por otro lado, también podemos analizar el ancho del DE en las OM, dado por la diferencia de fase $2\Delta = 4\mu_B/\mu$. Este ancho también afecta la visualización del DE en M , puesto que para valores bajos de μ , la fase 2Δ se vuelve insignificante en relación al periodo de las oscilaciones. De esta manera conviene comparar 2Δ con el ancho del periodo de oscilaciones, dado por $1/\omega = (\alpha/\mu)^2$.

En la Fig. 4.5(b) graficamos $\Delta M_s/A_+$ y $2\Delta\omega$, como función de la energía de Fermi μ . Podemos observar que para valores $\mu \lesssim 100$ meV tenemos $\Delta M_s/A_+ \sim 10^{-2}$, mientras que también $2\Delta\omega$ es muy pequeño, lo cual hace que el efecto del DE en las OM sea prácticamente inobservable. Sin embargo, a energías de Fermi más altas, alrededor de $\mu \gtrsim 250$ meV, tenemos que $2\Delta\omega$ aumenta y $\Delta M_s/A_+ \sim 10^{-1}$, de manera que el efecto del espín se vuelve más evidente. En consecuencia, podemos decir que para tener en cuenta el efecto del DE en las OM a μ constante, se requiere valores de μ aproximadamente mayores que 200 meV. Notar que este resultado no depende B , puesto que tanto $\Delta M_s/A_+$ como $2\Delta\omega$ son independientes del campo magnético.

4.2.3. Comparación entre los casos N o μ constante

De acuerdo a lo visto en las secciones anteriores, las OM en el estado fundamental difieren dependiendo de si el sistema mantiene N o μ constante. Esta diferencia puede relacionarse con cómo debe cambiar el potencial químico μ si la cantidad de electrones N debe mantenerse constante, o viceversa. En metales 3D, estas oscilaciones de μ son en general muy pequeñas, de manera que usualmente se desprecian y las OM se describen en general considerando μ constante^[83]. La razón de esto reside en la integral de las OM sobre todas las direcciones κ (siendo $\hat{\kappa}$ la dirección del campo magnético aplicado) en las cuales los NL dependenⁱ. El resultado es que las oscilaciones de μ se reducen en más de un orden de magnitud. Esto no ocurre en los materiales 2D, al ser independientes de κ , por lo que las oscilaciones de μ pueden ser significativas.

En consecuencia resulta importante estudiar cuáles son y a qué se deben las diferencias en las OM para los casos N o μ constante. El análisis será importante no solo para entender las OM en el estado fundamental, sino también al considerar los efectos de decaimiento debido a la temperatura o impurezas. En efecto, como veremos en el próximo capítulo, el análisis de estos efectos de decaimiento es mucho más fácil de tratar en el ensamble gran canónico, el cual implica μ constante. Es decir, el decaimiento en las OM se verá en relación a las OM en el estado fundamental para el caso de μ constante. Así, para entender cómo se vería dicho

ⁱPor ejemplo, los niveles de Landau en 3D para un electrón libre son $\varepsilon_{n,\kappa} = aB(n + 1/2) + \hbar^2\kappa^2/2m_e$, donde $a = e\hbar/m_e$ es el doble magnetón de Bohr.

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

decaimiento para el caso de N constante, resulta instructivo entender las diferencias entre las OM, en el estado fundamental, para μ o N constante.

4.2.3.1. Frecuencia y fase

En la sección 4.2.1 se obtuvo que para N constante, las OM ocurren en valores $\nu = 2, 4, 6, 8, \dots$, donde $\nu = n_e\phi/B$. En particular, los cambios de NL y espín, con amplitud A_{LS} , ocurren para valores $\nu = 2, 6, 10, \dots$, mientras que los cambios solo de espín, con amplitud A_S , ocurren para valores $\nu = 4, 8, 12, \dots$. Para μ constante, en la sección 4.2.2 se obtuvo que las oscilaciones ocurren para campos $1/B = n/\omega \pm 2\mu_B/\mu$, donde $n = 1, 2, 3, \dots$ y $\omega = (\mu/\alpha)^2$ es la frecuencia de las OM, con $\alpha = v_F\sqrt{2e\hbar}$. Para comparar ambos casos, consideramos que n_e y μ están relacionados a través de la conservación de la cantidad de estados sin campo magnético, donde la DOS por área es $\rho(\varepsilon) = 2|\varepsilon|/\pi\hbar^2v_F^2$ (ver sección 3.1.5). Luego

$$n_e = \int_0^\mu \frac{8\pi\varepsilon}{\hbar^2v_F^2} d\varepsilon, \quad (4.62)$$

lo cual implica $(\mu/\alpha)^2 = \omega = n_e\phi/4$. Por lo tanto, teniendo en cuenta las ec. (4.38), (4.39) y (4.51), las OM ocurren en campos magnéticos

$$\frac{1}{B} = \frac{2n}{n_e\phi} \quad (N \text{ constante}) \quad (4.63)$$

$$\frac{1}{B} = \frac{4n}{n_e\phi} \pm \frac{4\mu_B}{\alpha\sqrt{n_e\phi}} \quad (\mu \text{ constante}), \quad (4.64)$$

donde $n = 1, 2, 3, \dots$ es un entero. Esto puede observarse en la Fig. 4.6, donde se graficó las OM para N y μ constante en grafeno, en función de $1/B$, considerando $n_e = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Como vemos, la forma de las OM es diferente en cada caso. Para N constante, el pico de espín con amplitud A_S ocurre para valores $2n/n_e\phi$ con n par, es decir, para valores $4r/n_e\phi$ con r entero. Por lo tanto, el pico S ocurre en el medio de los picos para μ constante, como efectivamente se observa en la Fig. 4.6. Esto implica que, sin DE, las OM para N y μ constante están desfasadas en la mitad de su periodo, análogamente a como ocurre en el caso clásico^[85]. Notar, sin embargo, que la causa es diferente: en el caso clásico, este desfase se debe a la energía no nula del NL $n = 0$, mientras que en grafeno el desfase se debe a la degeneración $D/2$ del NL $n = 0$ en la banda de conducción.

4.2.3.2. Amplitud

Como se observa en la Fig. 4.6, las OM en cada caso no solo difieren en la frecuencia de las oscilaciones, sino también en la amplitud de las mismas. Esto determina, a su vez, cómo se observa el efecto del DE en las OM. Como se vio en las secciones anteriores, en el caso de

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

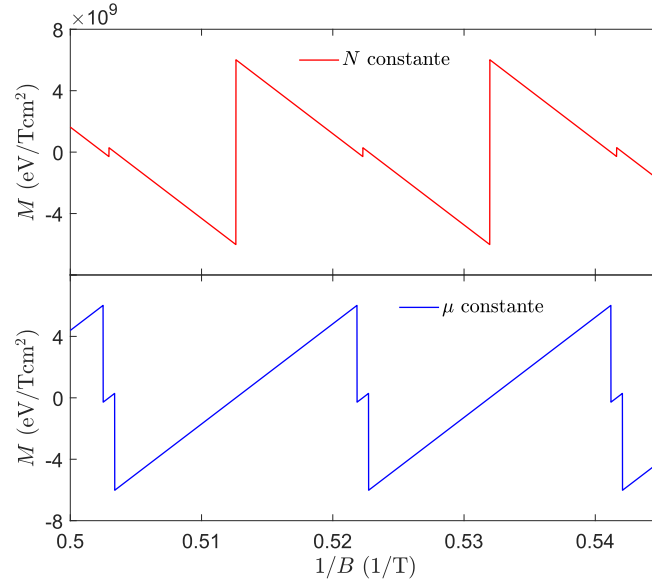


Figura 4.6: Oscilaciones magnéticas en grafeno, para los casos N y μ constantes, considerando $n_e = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $\mu = \alpha\sqrt{n_e\phi}/2 \simeq 0,26 \text{ eV}$.

Para N constante el DE se ve a partir del nuevo pico con amplitud $A_S = 2n_e\mu_B$ que ocurre para $1/B = 2n/n_e\phi$ con n par, y en la disminución de la amplitud del pico $A_{LS} = A_L - A_S$ que ocurre para $1/B = 2n/n_e\phi$ con n impar. En cambio, para μ constante, el DE se ve como la separación del pico en $1/B = n/\omega$ con amplitud $A = -2\mu/\phi$ (caso sin DE), en dos picos en $1/B = n/\omega \pm 2\mu_B/\mu$ con amplitudes $A_s = -(\mu - s\mu_B B)/\phi$. Así, el DE para N constante se ve reflejado en la aparición de una nueva OM con amplitud A_S , mientras que para μ constante el DE se ve reflejado en la separación en dos OM con amplitudes A_s . Esto nos dice que el papel predominante en las OM para N constante es la amplitud de las mismas, mientras que para μ constante es la fase de las mismas. En otras palabras, la presencia de diferentes OM en el caso de N constante tiene como variable principal la magnitud de las oscilaciones, las cuales pueden depender significativamente de la densidad electrónica. En cambio, las diferentes OM para μ constante tienen como variable principal la fase de las oscilaciones, siendo la amplitud de las mismas no muy diferentes entre sí.

En efecto, para N constante la diferencia entre la amplitud de los dos picos es $A_{LS} - A_S = A_L$, siendo en general $A_L \gg A_S$. En contraste, para μ constante la diferencia de amplitud de los picos desfasados es $|A_1 - A_{-1}| = 4\mu_B B/\phi \ll \mu/\phi$, teniendo en cuenta que en general $\mu_B B/\mu \ll 1$. Este comportamiento es, naturalmente, debido al origen de las OM en cada caso, como fue descrito arriba. Es decir, para N constante sabemos que toda oscilación ocurre en intervalos enteros de N/D , de forma que la fase de las oscilaciones no es una variable del sistema, siendo ésta más bien la amplitud de las OM. Para μ constante, las OM dependen del cruce de los niveles de energía con el nivel de Fermi μ , lo cual naturalmente da como variable la fase de las oscilaciones.

4.3. Materiales 2D con *buckling*

Como fue obtenido en la sección 3.2.4, en presencia de campo magnético B y eléctrico E_z perpendiculares, los niveles de energía para la banda de conducción, incluyendo el efecto Zeeman, son (para NL $n \geq 1$)

$$\varepsilon_{n,\eta,s} = \sqrt{(s\lambda_{SO} - \eta elE_z)^2 + \alpha^2 Bn - s\mu_B B}, \quad (4.65)$$

donde $\alpha = v_F \sqrt{2e\hbar}$, λ_{SO} es la interacción-espín órbita, l el *buckling* entre las subredes A y B , y consideramos $g = 2$ para el factor- g (al igual que en grafeno). Los valores de v_F , λ_{SO} y l , para los diferentes materiales 2D, están dados en la Tabla 3.1. En el formalismo de la sección 4.1.1, existe dos índices $\gamma = \{\eta = \pm 1, s = \pm 1\}$ (valle y espín), y una variable externa $X = E_z$ (campo eléctrico perpendicular). Este campo E_z rompe la degeneración de valle, de forma que degeneración de cada nivel de energía es $D = AB/\phi$, la mitad que en grafeno.

4.3.1. Oscilaciones magnéticas para N constante

Siguiendo el formalismo de la sección 4.1.2, debido a la ruptura de la degeneración de valle cuando $E_z \neq 0$, los NL no poseen ninguna degeneración extra y entonces $\lambda = 1$. Luego, según la ec. (4.1), en el estado fundamental el número de niveles de energía con NL $n \geq 1$ totalmente llenos es

$$q - 1 = \text{floor}[\nu - 2], \quad (4.66)$$

donde $\nu = n_e \phi / B$. En consecuencia existe un cambio de energía para todo ν entero, lo cual contrasta lo que sucede en grafeno, donde la degeneración de valle implica que hay un cambio de energía solo para ν pares [ver ec. (4.29)]. Es de esperar entonces que los cambios de energía asociados a un cambio de valle se producen cuando ν es impar.

Ahora bien, debido a la presencia del campo perpendicular E_z , y la consecuente ruptura de la degeneración de valle, el ordenamiento de los niveles de energía no es trivial. De hecho, en general depende del valor de E_z . Así, podría ser que E_z sea suficientemente grande tal que no exista un ordenamiento fijo de los niveles de energía (donde los cambios de valle y espín se repiten de manera periódica), sino un tipo de ordenamiento que dependa no solo de E_z , sino también de la densidad electrónica y el campo magnético. En dicho caso podrían darse discontinuidades en la magnetización que no se producen debido a un cambio en q (cantidad de niveles ocupados), sino a un cambio en el ordenamiento (o más bien mezcla) del valle y espín. Así, la función U^∂ [ec. (4.5)] no sería continua y por tanto contribuiría a las discontinuidades en la magnetización, lo cual, como vimos, no sucede en grafeno.

Bajo estas consideraciones, en cuanto a la posibilidad de un ordenamiento no fijo, resulta conveniente distinguir los casos de campo E_z pequeño y grande. Como veremos, en el caso

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

de E_z pequeño el efecto de ruptura en la degeneración de valle es relativamente pequeño tal que se mantiene un ordenamiento fijo, aunque dependiente del valle. En cambio, si E_z es grande entonces el desdoblamiento de valle en los niveles es suficiente para generar una mezcla de los índice de espín y valle, y por tanto un ordenamiento no fijo.

Formalmente, los niveles de energía (4.65) ordenados se pueden escribir

$$\varepsilon_r = \sqrt{(s_r \lambda_{SO} - \eta_r e l E_z)^2 + \alpha^2 B n_r} - s_r \mu_B B, \quad (4.67)$$

Los índices $n_r = 1, 2, 3, \dots$, $\eta_r = \pm 1$ y $s_r = \pm 1$ dan el NL, el valle y el espín en la posición ordenada r . De acuerdo a lo discutido arriba, queda claro que en general estos índices dependen de E_z , n_e y B . Vale destacar que grafeno puede considerarse un caso especial, con $\lambda_{SO} \simeq 0$ y $l = 0$ (sin *buckling*), en cuyo caso no hay dependencia con E_z y por tanto η_r .

4.3.1.1. Mezcla de NL, valle y espín

Como ya se mencionó, el ordenamiento de ε_r depende del valor de E_z . Resulta entonces instructivo analizar cómo varía este ordenamiento al variar el campo eléctrico. Puesto que las OM dependen en realidad solo del cambio en el último nivel ocupado ε_q , es suficiente con analizar los cambios en los parámetros de ordenamiento $r = q$. En particular, estamos interesados en cómo varían los parámetros n_q , η_q y s_q con el campo magnético, para diferentes valores de $e l E_z$. El valor de estos parámetros depende de la posición ordenada q , lo cual a su vez depende de cómo es el mezclado de NL, valle y espín. Teniendo en cuenta las energías ordenadas de acuerdo a la ec. (4.67), en la Fig. 4.7 se muestran los parámetros n_q , η_q y s_q para siliceno, como función de $\nu = n_e \phi / B$ y diferentes valores de $e l E_z$, considerando una densidad electrónica $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Como podemos ver en la Fig. 4.7(a), cuando $E_z = 0$ no hay un parámetro η_q puesto que cada nivel de energía tiene una doble degeneración de valle. Luego el último nivel ε_q cambia discontinuamente solo cuando el NL n_q , el espín s_q o ambos cambian. La situación es análoga, por supuesto, al caso de grafeno. Cuando $E_z \neq 0$, la degeneración de valle se rompe y los niveles de energía empiezan a depender de η_q . Esto puede observarse en la Fig. 4.7(b), donde para $e l E_z = 5 \text{ meV}$ los parámetros empiezan a variar de manera diferente. Aún así, notar que tanto en la Fig. 4.7(a) como en la Fig. 4.7(b) no hay un mezclado apreciable de los parámetros. Esto implica que en cada caso n_q siempre decrece si B aumenta, mientras que η_q y s_q siempre alternan entre -1 y 1 de la misma manera. En otras palabras, en ambos casos (a) y (b) existe un ordenamiento fijo y todo cambio en los parámetros es producido por un cambio en q , de manera que las discontinuidades en la magnetización están dadas por la ec. (4.9). Sin embargo, esto empieza a cambiar si E_z sigue incrementándose, puesto que entonces los parámetros empiezan a variar de manera complicada.

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

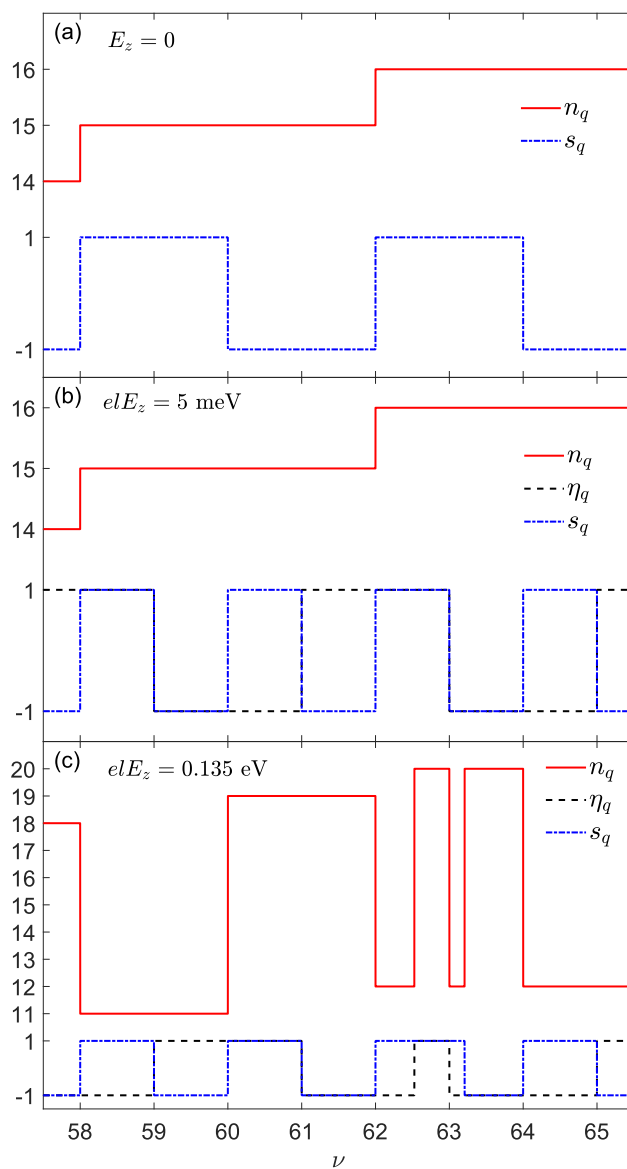


Figura 4.7: Para siliceno, parámetros n_q , η_q y s_q , para el último nivel ocupado ε_q , en función del factor de llenado $\nu = n_e \phi / B$, para diferentes valores del campo eléctrico perpendicular E_z . La densidad electrónica es $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Esto puede observarse en la Fig. 4.7(c), donde para $elE_z = 135 \text{ meV}$, vemos que hay una notoria mezcla de los parámetros. Ya no existe un ordenamiento fijo, y los parámetros varían en función de cómo es el campo magnético. En particular, el índice de Landau n_q no crece siempre con ν , como sucede para bajos E_z , sino que crece o decrece (con grandes saltos) sin un orden aparente. Notar también que, mientras en los casos anteriores (a) y (b) los parámetros siempre cambian cuando ν es un entero (es decir, siempre que q cambia), para $elE_z = 135 \text{ meV}$ vemos que esto no siempre sucede. En efecto, se observa variación de los parámetros para $\nu \simeq 62,5$ y $\nu \simeq 63,2$, que no corresponden a un cambio de q . Dichas

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

variaciones en los parámetros dan lugar a discontinuidades en la magnetización causadas por la función U^∂ dada por la ec. (4.5).

4.3.1.2. Clasificación de los picos de OM

Ya sabemos que las discontinuidades en la magnetización, en el estado fundamental, se producen por los cambios $\Delta\varepsilon_q$ en el último nivel ocupado, y/o por las discontinuidades en el término U^∂ . Todos estos cambios dependen de la variación de n_q , η_q y s_q . Por lo tanto se puede realizar una clasificación de los picos de las OM en términos de cuáles parámetros cambian. En general podemos definir 7 tipos de picos, considerando los cambios de NL, valle y espín, junto con sus combinaciones. Esto puede observarse en la Tabla 4.2.

Cambio de NL	Cambio de valle	Cambio de espín	Tipo de pico
✓	×	×	L
✓	✓	×	LV
✓	×	✓	LS
✓	✓	✓	LVS
×	✓	×	V
×	✓	✓	VS
×	×	✓	S

Tabla 4.2: Clasificación de los picos de las OM de acuerdo a los cambios en los parámetros n_q , η_q y s_q . Las nomenclaturas, en la última columna, hacen referencia a los tipos de cambios (L: cambio de NL, V: cambio de valle, S: cambio de espín).

Cada tipo de pico tiene, a su vez, sus propios subpicos, correspondientes a los posibles formas en las cuales los parámetros pueden cambiar. El tipo de subpico puede ser identificado a partir de los cambios en n_q , η_q y s_q . En general notaremos a los subpicos como $X_{\bar{n}, \bar{\eta}, \bar{s}}$, donde $X = \{L, LV, LS, LVS, V, VS, S\}$ identifica el tipo de pico de acuerdo a la clasificación de la Tabla 4.2, mientras que \bar{n} , $\bar{\eta}$ y \bar{s} indican cómo es el cambio (si lo hay) de los parámetros. Por convención indicaremos el tipo de cambio al considerar ν creciente (por supuesto, el cambio es inverso al considerar ν decreciente). Por ejemplo, considerar un pico LS correspondiente a un cambio de NL $n = 5 \rightarrow 4$ y espín¹ $\uparrow \rightarrow \downarrow$, en el valle K . Luego identificamos a este pico como $LS_{K, \uparrow \rightarrow \downarrow}^{5 \rightarrow 4}$.

Esta clasificación de las picos de las OM nos da una forma sistemática de reconocerlos en un gráfica de magnetización. Un procedimiento podría ser analizar primero cómo están ordenados los niveles de energía (como se realizó en la Fig. 4.7), a partir de lo cual se puede predecir qué tipos de picos aparecerán y en qué orden. Esto se realizará a continuación, primero para el caso $eE_z \ll 1$ eV, donde ya vimos que existe un ordenamiento fijo, y luego

¹Indicaremos \uparrow y \downarrow a los espines up y down.

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

para el caso general en el cual elE_z puede tomar cualquier valor y el ordenamiento de los niveles de energía no es fijo.

4.3.1.3. Límite $elE_z \ll 1$ eV

Consideraremos valores pequeños de elE_z , tal que los parámetros cambian solo cuando q también lo hace. Por lo tanto en este régimen la función U^θ es continua y solo $\Delta\varepsilon_q$ contribuye a las OM, de acuerdo a la ec. (4.9). A fines prácticos, consideraremos los campos $E_z = 0$ y $elE_z = 5$ meV, en cuyo caso el ordenamiento de los parámetros está dado por la Fig. 4.7. Luego, siguiendo la clasificación de la Tabla 4.2, en la Fig. 4.7(a) podemos ver que los posibles tipos de picos en las OM a $E_z = 0$ son los LS y S, con orden LS, S, LS, S,... Notar que esto es efectivamente lo que ocurre en grafeno, donde existe degeneración de valle. Por otro lado, en la Fig. 4.7(b) vemos que para $elE_z = 5$ meV, los posibles picos son LS, VS y S, con orden LS, VS, S, VS, LS,...

Para $E_z = 0$ se mantiene la degeneración de valle y los niveles de energía dependen solo del NL y el espín. Por ello la situación es análoga al caso de grafeno. Es decir, la degeneración adicional de cada nivel de energía es $\lambda = 2$, y el número total de niveles (NL $n \geq 1$) totalmente ocupados es $q - 1 = \text{floor}[\nu/2 - 1]$. Las amplitudes A_{LS} y A_S están entonces dadas por las ec. (4.36) y (4.37), que teniendo en cuenta la interacción espín-órbita en los materiales 2D con *buckling*, resultan

$$A_{LS} = \frac{\alpha n_e}{2B^{1/2}} \left[\sqrt{\left(\frac{2\lambda_{SO}}{\alpha B^{1/2}}\right)^2 + \nu + 2} - \sqrt{\left(\frac{2\lambda_{SO}}{\alpha B^{1/2}}\right)^2 + \nu - 2} \right] - 2n_e\mu_B \quad (4.68)$$

$$A_S = 2n_e\mu_B. \quad (4.69)$$

Notar que A_{LS} se reduce a la ec. (4.36) si $\lambda_{SO} = 0$. Vemos entonces que, para $E_z = 0$, la única diferencia respecto de grafeno está dada por la inclusión de la IEO, la cual a su vez solo afecta la amplitud de las OM asociadas a un cambio de NL. Esto es de esperar, puesto que la amplitud de las OM debido al DE solo depende del efecto Zeeman, siendo éste el mismo tanto en grafeno como en los materiales con *buckling* (asumiendo por supuesto el mismo factor-g). A su vez, para $E_z = 0$ el periodo y la fase de estas oscilaciones es la misma que en grafeno, y están dadas por las ec. (4.38) y (4.39). Por lo tanto las SO para $E_z = 0$, en los materiales con *buckling*, están dadas por la ec. (4.45), teniendo en cuenta el cambio de amplitud A_{LS} dada por la ec. (4.68). La amplitud de la serie coseno está dada por la

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

expresión (4.58), pero con A_{LS} dado por (4.68) y

$$\left(\frac{\partial A_{LS}}{\partial B}\right) = \frac{1}{2B} A_L \left\{ \frac{(2\lambda_{SO}/\alpha B^{1/2})^2 + \nu}{\sqrt{[(2\lambda_{SO}/\alpha B^{1/2})^2 + \nu]^2 - 4}} - 1 \right\}, \quad (4.70)$$

donde, como antes, $A_L = A_{LS} + A_S$. Notar que la ecuación anterior se reduce a la ec. (4.43) si $\lambda_{SO} = 0$. El mismo análisis es entonces válido para $\nu \gg 1$, aunque ahora la condición es más bien $(2\lambda_{SO}/\alpha B + \nu) \gg 1$, dependiendo entonces no solo de la cantidad de NL ocupados, sino también de la energía de Landau y la interacción espín-órbita. La expresión total de las OM, para $E_z = 0$, está dada por la ec. (4.44), teniendo en cuenta las nuevas amplitudes A_{LS} y A_{LS}^{cos} .

La situación es más interesante cuando $E_z \neq 0$ y la degeneración de valle se rompe, dando lugar a nuevos picos en las OM. Para $elE_z = 5$ meV, siguiendo la Fig. 4.7(b), aparece el pico VS y el orden de los picos es LS, VS, S, VS, LS,... El pico LS corresponde a un cambio de espín down a up en el valle K . El pico VS corresponde a $\{K \rightarrow K', \uparrow \rightarrow \downarrow\}$ o $\{K' \rightarrow K, \uparrow \rightarrow \downarrow\}$, mientras que el pico S siempre corresponde a un cambio de espín down a up en el valle K' . La ruptura en la degeneración de valle implica $\lambda = 1$, con la cantidad de NL totalmente ocupados ($n \geq 1$) dado por la ec. (4.66). El ordenamiento de ε_r indicado en la Fig. 4.7(b) es tal que $\Delta q = \{\Delta n_q; \Delta \eta_q; \Delta s_q\}$ se repite cada $\ell = 4$ cambios. Los 4 tipos de picos, según la clasificación de la Tabla 4.2, con su correspondiente cambio en los índices $\Delta q = \{\Delta n_q; \Delta \eta_q; \Delta s_q\}$, están indicados en la Tabla 4.3.

Tipo de pico	Ocurre cuando	Δn_q	$\Delta \eta_q$	Δs_q
$LS_{K,\downarrow \rightarrow \uparrow}^{n_q \rightarrow n_q+1}$	$q = 1, 5, 9, \dots$	1	0	2
$VS_{K \rightarrow K', \uparrow \rightarrow \downarrow}^{n_q}$	$q = 2, 6, 10, \dots$	0	-2	-2
$S_{K', \downarrow \rightarrow \uparrow}^{n_q}$	$q = 3, 7, 11, \dots$	0	0	2
$VS_{K' \rightarrow K, \uparrow \rightarrow \downarrow}^{n_q}$	$q = 4, 8, 12, \dots$	0	2	-2

Tabla 4.3: Propiedades de los 4 tipos de picos presentes cuando $elE_z \ll 1$ eV, según la clasificación de la Tabla 4.2 y el ordenamiento de los parámetros según la Fig. 4.7(b). En función del factor de llenado los picos ocurren cuando $\nu = q + 1$ [ec. (4.66)].

Este ordenamiento de los niveles de energía ε_r implica que la dependencia de los índices con el parámetro de ordenamiento r es

$$n_r = \text{floor} \left[\frac{r+3}{4} \right] \quad (4.71)$$

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

$$\eta_r = (-1)^{\text{floor}[r/2]} \quad (4.72)$$

$$s_r = (-1)^{r+1}. \quad (4.73)$$

Notar que, efectivamente, n_r varía cada 4 cambios de r , η_r cada 2 cambios, mientras que el espín siempre cambia (se invierte) entre nivel y nivel. De esta manera, para los picos indicados en la Tabla 4.3, considerando la expresión de los niveles ordenados (4.67) y la ec. (4.9), las amplitudes de las OM son

$$A_{LS} = \frac{\alpha n_e}{2B^{1/2}} (X_{+,-} - X_{-,+}) - 2n_e\mu_B \quad (4.74)$$

$$A_{VS} = 2n_e\mu_B \quad (4.75)$$

$$A_S = \frac{\alpha n_e}{2B^{1/2}} (X_{+,+} - X_{+,-}) - 2n_e\mu_B, \quad (4.76)$$

donde definimos la función

$$X_{a,b} = \sqrt{\frac{4}{\alpha^2 B} (\lambda_{SO} + b\ell E_z)^2 + \nu + 2a} \quad (a, b = \pm 1). \quad (4.77)$$

El pico VS, que ocurre debido a los cambios $\{K \rightarrow K', \uparrow \rightarrow \downarrow\}$ o $\{K' \rightarrow K, \uparrow \rightarrow \downarrow\}$ (es decir, dos subpicos), siempre tiene la misma amplitud $A_{VS} = 2n_e\mu_B$, que es igual a la amplitud del pico S en el caso $E_z = 0$. En cambio, cuando $E_z \neq 0$ el pico S tiene una amplitud que depende de la interacción espín-órbita. Esto se debe a que si $E_z \neq 0$, el factor $(s\lambda_{SO} - \eta\ell E_z)$ cambia al producirse solo un cambio de espín (es decir, η no cambia). Las fases de estos picos son, con $\lambda = 1$ y $\ell = 4$ en la ec. (4.11),

$$\psi_{LS} = \frac{n_e\phi}{4B} - \frac{1}{2} \quad (4.78)$$

$$\psi_{VS} = \frac{n_e\phi}{2B} - \frac{1}{2} \quad (4.79)$$

$$\psi_S = \frac{n_e\phi}{4B}, \quad (4.80)$$

donde se definió una única fase para los picos VS, que es la mitad del periodo de los picos LS y Sⁱ, teniendo en cuenta que la amplitud A_{VS} es la misma para los dos subpicos VS en $i = 2$ y $i = 4$. De esta manera, la expresión de las OM se modifica, respecto del caso $E_z = 0$, al considerar el cambio en las amplitudes A_{LS} y A_S (teniendo en cuenta la dependencia con E_z), y el nuevo pico VS que ocurre entre medio de los picos LS y S, con doble frecuencia.

ⁱEl doble de frecuencia proviene de los dos subpicos VS que ocurren: $\{K \rightarrow K', \uparrow \rightarrow \downarrow\}$ y $\{K' \rightarrow K, \uparrow \rightarrow \downarrow\}$. Cada subpico VS tiene la misma frecuencia que los picos LS y S, dada por $n_e\phi/4$ (ver ec. (4.11) con $\lambda = 1$ y $\ell = 4$, donde los subpicos VS corresponden a $i = 2, 4$, de acuerdo a la Tabla 4.3).

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

Así, la contribución de las SO resulta

$$M_{SO} = A_{LS} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi p} \operatorname{sen} \left[2\pi p \left(\frac{n_e \phi}{4B} - \frac{1}{2} \right) \right] + A_S \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi p} \operatorname{sen} \left(2\pi p \frac{n_e \phi}{4B} \right) + A_{VS} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi p} \operatorname{sen} \left[2\pi p \left(\frac{n_e \phi}{2B} - \frac{1}{2} \right) \right], \quad (4.81)$$

Las amplitudes de la siguiente contribución a las OM, dada por la serie coseno, se obtienen de la ec. (4.14), teniendo en cuenta la expresión de las amplitudes para el caso $E_z \neq 0$. El resultado es

$$A_{LS}^{cos} = \frac{4B}{n_e \phi} \left[A_{LS} + \frac{B}{2} \left(\frac{\partial A_{LS}}{\partial B} \right) \right] \quad (4.82)$$

$$A_{VS}^{cos} = \frac{2B}{n_e \phi} A_{VS} \quad (4.83)$$

$$A_S^{cos} = \frac{4B}{n_e \phi} \left[A_S + \frac{B}{2} \left(\frac{\partial A_S}{\partial B} \right) \right], \quad (4.84)$$

donde

$$\left(\frac{\partial A_{LS}}{\partial B} \right) = \frac{\alpha n_e}{4B^{3/2}} (X_{+,-} - X_{-,+}) \left\{ \frac{4}{\alpha^2 B X_{+,-} X_{-,+}} [\lambda_{SO}^2 + (elE_z)^2] + \nu - 1 \right\} + \frac{2n_e}{\alpha B^{5/2}} \lambda_{SO} elE_z \left(\frac{X_{+,-} + X_{-,+}}{X_{+,-} X_{-,+}} \right) \quad (4.85)$$

$$\left(\frac{\partial A_S}{\partial B} \right) = \frac{\alpha n_e}{4B^{3/2}} (X_{+,+} - X_{+,-}) \left\{ \frac{4}{\alpha^2 B X_{+,+} X_{+,-}} [\lambda_{SO}^2 + (elE_z)^2] + \nu - 1 \right\} - \frac{2n_e}{\alpha B^{5/2}} \lambda_{SO} elE_z \left(\frac{X_{+,+} + X_{+,-}}{X_{+,+} X_{+,-}} \right). \quad (4.86)$$

Notar que si $E_z = 0$ entonces $X_{a,+} = X_{a,-}$ y $\partial A_S / \partial B = 0$, mientras que $\partial A_{LS} / \partial B$ se reduce a la ec. (4.70). A su vez, si $l = 0 = \lambda_{SO}$ se tiene grafeno y la ec. (4.85) se reduce a la ec. (4.43), como es de esperar. Finalmente, las OM quedan

$$M_{osc} = M_{SO} + A_{LS}^{cos} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{(\pi p)^2} \cos \left[2\pi p \left(\frac{n_e \phi}{4B} - \frac{1}{2} \right) \right] + A_S^{cos} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{(\pi p)^2} \cos \left(2\pi p \frac{n_e \phi}{4B} \right) + \frac{4B\mu_B}{\phi} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{(\pi p)^2} \cos \left[2\pi p \left(\frac{n_e \phi}{2B} - \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (4.87)$$

Vale destacar que, análogamente a como sucede en grafeno, en el caso de alta ocupación tal que $\nu \gg 1$ (lo cual implica q grande), las series coseno en la ec. (4.87) son despreciables y

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

las OM puede escribirse como SO puras

$$M_{osc} \simeq \frac{A_{LS}}{\pi} \arctan \left\{ \cot \left[\pi \left(\frac{n_e \phi}{4B} - \frac{1}{2} \right) \right] \right\} + \frac{A_S}{\pi} \arctan \left[\cot \left(\pi \frac{n_e \phi}{4B} \right) \right] + \frac{A_{VS}}{\pi} \arctan \left\{ \cot \left[\pi \left(\frac{n_e \phi}{2B} - \frac{1}{2} \right) \right] \right\}. \quad (4.88)$$

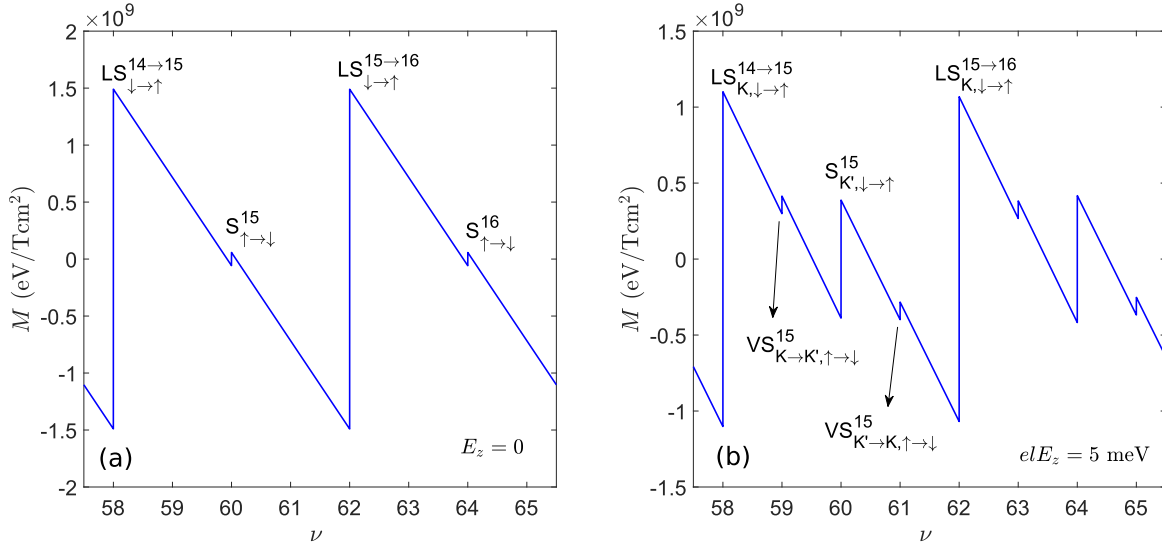


Figura 4.8: Oscilaciones magnéticas en siliceno, en función de $\nu = n_e \phi / B$, considerando una densidad electrónica $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, para los casos (a) $E_z = 0$ y (b) $elE_z = 5 \text{ meV}$. Los picos de la magnetización están clasificados de acuerdo a la Tabla 4.2 y la Fig. 4.7.

En la Fig. 4.8 se muestran las OM en siliceno, como función de $\nu = n_e \phi / B$, para una densidad electrónica $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, para los casos $E_z = 0$ y $elE_z = 5 \text{ meV}$. Se observa que las OM son prácticamente SO, de manera que la aproximación (4.88) es válida. Las discontinuidades en las OM están clasificadas de acuerdo a la Tabla 4.2 y el ordenamiento de los niveles según la Fig. 4.7. Para $E_z = 0$ vemos efectivamente solo los picos LS y S, y el perfil de las OM es el mismo que ya vimos en grafeno. En particular, sigue siendo válido el mismo análisis en cuanto al efecto del DE en la amplitud de las OM (secciones 4.2.1.1 y 4.2.1.2). Para $elE_z = 5 \text{ meV}$, se observa la aparición de los picos VS entre los picos LS y S. Notar que la amplitud de los picos VS es la misma que en los picos S cuando $E_z = 0$, como es de esperar. Es de destacar, a su vez, el cambio significativo en la amplitud del pico S cuando $E_z \neq 0$. De hecho, como se verá más adelante, la variación de las amplitudes de oscilación, cuando $E_z \neq 0$, da lugar a un fenómeno de batido en las OM.

Cuando $E_z \neq 0$, las discontinuidades en la magnetización en el estado fundamental están dadas por las ec. (4.74)-(4.76). De éstas, solo los picos LS y S tiene una amplitud que depende del campo eléctrico perpendicular. La dependencia de A_{LS} y A_S con E_z permite tener un

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

control de la amplitud de las OM en función del campo aplicado. En la Fig. 4.9 se muestran las amplitudes A_{LS} y A_S como función la energía elE_z .

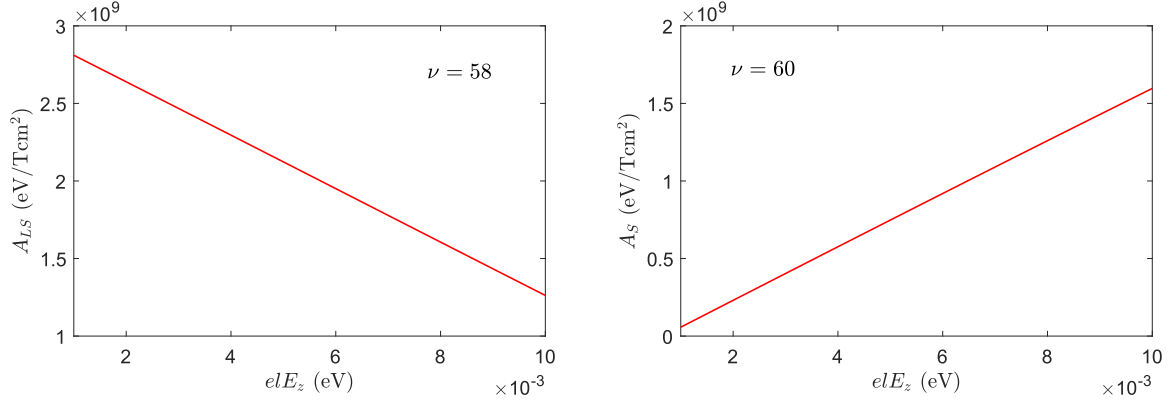


Figura 4.9: En siliceno, dependencia de las amplitudes A_{LS} y A_S con el campo eléctrico perpendicular E_z , para una densidad electrónica $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Como se observa, cuando $elE_z \ll 1 \text{ eV}$ la dependencia de las amplitudes con el campo E_z es prácticamente lineal. En efecto, a bajo campo E_z podemos expandir las ec. (4.74) y (4.76) a primer orden, obteniéndose

$$A_{LS} \simeq \frac{\alpha n_e}{2B^{1/2}} \left[Y_+ - Y_- - \frac{4\lambda_{SO}}{\alpha^2 B} \left(\frac{Y_+ + Y_-}{Y_+ Y_-} \right) elE_z \right] - 2n_e \mu_B \quad (4.89)$$

$$A_S \simeq \frac{4\lambda_{SO} n_e}{\alpha Y_+ B^{3/2}} elE_z - 2n_e \mu_B, \quad (4.90)$$

donde $Y_{\pm} \equiv X_{a,b}(E_z = 0) = B^{-1} (2\lambda_{SO}/\alpha)^2 + \nu \pm 2$. Así, la amplitud de los picos es lineal con E_z , con la pendiente y la ordenada dependientes de λ_{SO} y α . Estudiando entonces cómo varía la amplitud de los picos con E_z , uno podría estimar los parámetros λ_{SO} y α .

4.3.1.4. Caso general para E_z

En el caso general de E_z , la mezcla de los parámetros n_q , η_q y s_q depende del valor específico de elE_z . Ya vimos en la Fig. 4.7(c) que estos parámetros varían de una manera complicada al incrementar elE_z . En consecuencia, para cada valor específico de E_z , uno debería primero ver cómo están ordenados los niveles si se quiere identificar los picos de las OM. Más aún, en el caso general la función U^∂ [ec. (4.5)] ya no es una función continua (como sí sucede para $elE_z \ll 1 \text{ eV}$), por lo que puede contribuir a las OM. Esta discontinuidad en U^∂ ocurre debido un cambio en el ordenamiento de los niveles ε_r que no está asociado a un cambio en q (la última posición ocupada). Para ver esto, considerar los niveles ordenados

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

(4.67), de manera que

$$\frac{\partial \varepsilon_r}{\partial B} = \frac{\alpha^2 B}{[(s_r \lambda_{SO} - \eta_r e l E_z)^2 + \alpha^2 B n_r]^{1/2}} - s_r \mu_B. \quad (4.91)$$

Ahora bien, si el ordenamiento de ε_r varía sin que se produzca un cambio en q , entonces ε_q varía continuamente pero, en general, $\partial \varepsilon_q / \partial B$ no varía continuamente, puesto que la ecuación anterior indica que $\partial \varepsilon_r / \partial B$ no es proporcional a ε_r . Esto conlleva a que la función U^∂ varíe discontinuamente cuando se produce este tipo de cambio, no asociado a una variación de q . La correspondiente amplitud en la magnetización, de acuerdo a las ec. (4.5) y (4.4), es

$$\Delta M^\partial = -\frac{\theta}{\phi} \left(\frac{\partial \varepsilon_{q_f}}{\partial B} - \frac{\partial \varepsilon_{q_i}}{\partial B} \right), \quad (4.92)$$

donde los índices q_f y q_i indican el valor de los parámetros n_q , η_q y s_q , finales e iniciales, cuando se produce el cambio $\varepsilon_{q_i} \rightarrow \varepsilon_{q_f}$. Estos parámetros deben evaluarse en el valor de B para el cual se produce dicho cambio.

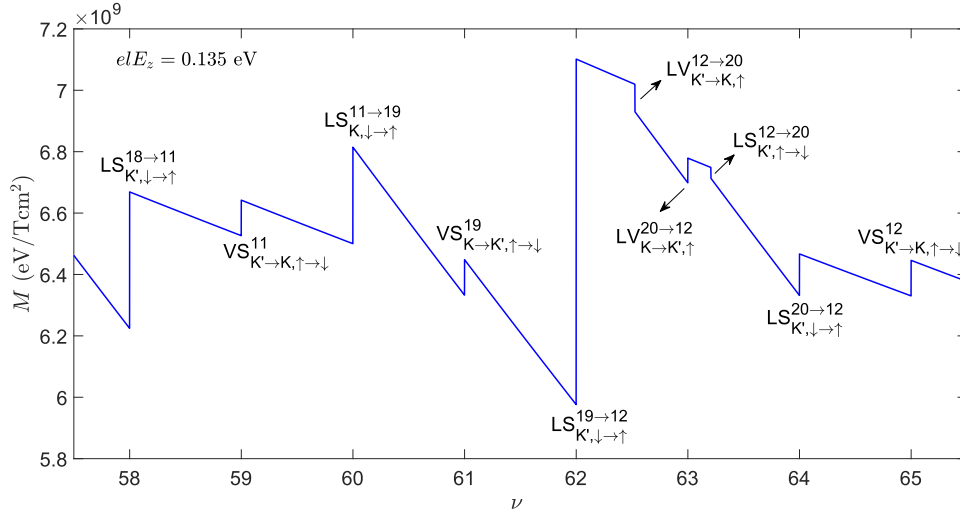


Figura 4.10: Magnetización en siliceno, como función de $\nu = n_e \phi / B$, considerando una densidad electrónica $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, para $elE_z = 0,135 \text{ eV}$. Los picos de la magnetización están clasificados de acuerdo a la Tabla 4.2 y el ordenamiento de los niveles energía según la Fig. 4.7(c).

A modo de ejemplo, consideramos el caso de $elE_z = 0,135 \text{ eV}$, donde n_q , η_q y s_q como función de ν están dados por la Fig. 4.7(c). El resultado es la magnetización mostrada en la Fig. 4.10, calculada de manera numérica con la ec. (4.4), considerando el ordenamiento de los niveles mostrado en la Fig. 4.7(c). Como se observa, se identifican 10 picos para $57 < \nu < 66$, los cuales se clasificaron de acuerdo a la Tabla 4.2. El mezclado de los parámetros altera drásticamente la magnetización, con discontinuidades que varían significativamente

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

en amplitud al variar el campo magnético. En particular, notar las discontinuidades que ocurren cuando ν no es un entero, en $\nu \simeq 62,5$ y $\nu \simeq 63,2$, que producen los picos $\text{LV}_{\text{K}' \rightarrow \text{K}, \uparrow}^{12 \rightarrow 20}$ y $\text{LS}_{\text{K}', \uparrow \rightarrow \downarrow}^{12 \rightarrow 20}$. En dichos picos la magnetización disminuye al aumentar ν , lo cual contrasta con el comportamiento en los demás picos que ocurren cuando ν es un entero. Esto ya nos indica que los picos $\text{LV}_{\text{K}' \rightarrow \text{K}, \uparrow}^{12 \rightarrow 20}$ y $\text{LS}_{\text{K}', \uparrow \rightarrow \downarrow}^{12 \rightarrow 20}$ son producidos por la variación discontinua en U^∂ , la cual contribuye con signo opuesto a ε_q en la magnetización [ver. ec. (4.4)].

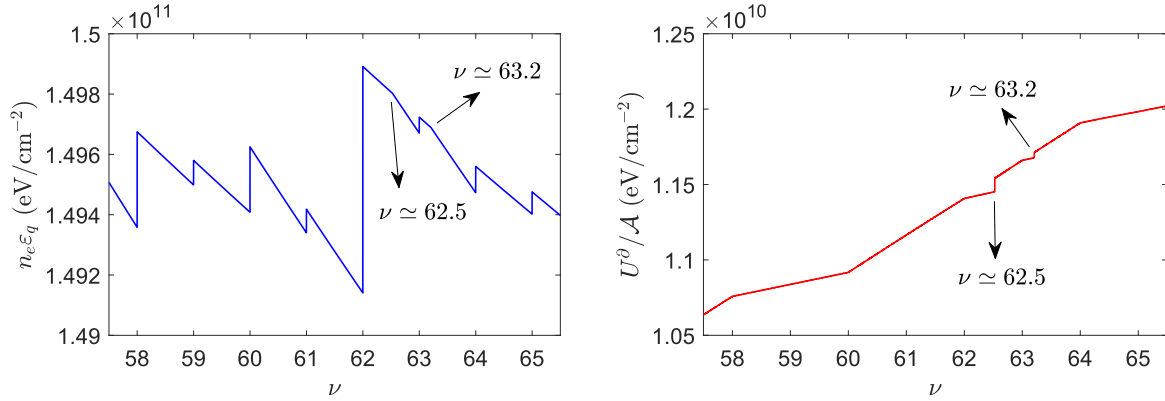


Figura 4.11: Para el siliceno, gráfico de $n_e \varepsilon_q$ y la función U^∂ dada por la ec. (4.5), como función de $\nu = n_e \phi / B$, con $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $elE_z = 0,135 \text{ eV}$. En ambas figuras se indican las discontinuidades en U^∂ que ocurren cuando ν no es un entero.

Para ver esto más claramente, en la Fig. 4.11 graficamos $n_e \varepsilon_q$ y U^∂/A , como función de ν , para los mismos valores que en la Fig. 4.10. Se observa entonces claramente que ε_q varía discontinuamente solo cuando ν es un entero, donde U^∂ varía continuamente y solo cambia su pendiente. En cambio, U^∂ varía discontinuamente en $\nu \simeq 62,5$ y $\nu \simeq 63,2$, en donde ε_q varía continuamente y solo cambia su pendiente. En consecuencia se concluye que, efectivamente, los picos $\text{LV}_{\text{K}' \rightarrow \text{K}, \uparrow}^{12 \rightarrow 20}$ y $\text{LS}_{\text{K}', \uparrow \rightarrow \downarrow}^{12 \rightarrow 20}$ en la magnetización son causados por la variación discontinua de U^∂ . Es importante destacar que el cambio de pendiente en ε_q , cuando U^∂ varía discontinuamente, indica que hay un cambio en el último nivel ocupado que no es debido a una variación en la cantidad de niveles ocupados.

4.3.2. Oscilaciones magnéticas para μ constante

Según el formalismo de la sección 4.1.1, Los niveles de energía (4.65) dependen de dos índices $\gamma = \eta, s$ (valle y espín), y una variable $X = E_z$ (campo eléctrico perpendicular). La fase de las OM $\psi_{\eta, s}$, para el caso μ constante, se determinada por la ec. (4.20). Así, resolviendo $\varepsilon_{n, \eta, s} = \mu$ para n se obtiene

$$\psi_{\eta, s} = \frac{1}{B} \frac{(\mu + s\mu_B B)^2 - (s\lambda_{SO} - \eta elE_z)^2}{\alpha^2}$$

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

$$\simeq \frac{1}{B} \frac{\mu^2 + 2s\mu\mu_B B - (s\lambda_{SO} - \eta el E_z)^2}{\alpha^2}, \quad (4.93)$$

donde nuevamente consideramos $\mu_B B/\mu \ll 1$. Bajo esta aproximación, las OM son periódicas en B^{-1} , al igual que sucede en grafeno a μ constante, y en general en el caso N constante. La novedad radica en la dependencia de $\psi_{\eta,s}$ con el campo eléctrico E_z , a través del *buckling* de la red l , y la dependencia con la IEO λ_{SO} . Notar que esto implica que la fase $\psi_{\eta,s}$ ya no depende del espín solo a través del efecto Zeeman (que produce el término $s\mu\mu_B B$), sino también con el término $s\lambda_{SO}$. También vale notar que si $l = 0 = \lambda_{SO}$ como en grafeno, la fase $\psi_{\eta,s}$ no depende del valle (i.e. no depende del índice η), y se reduce a la fase en grafeno [ec. (4.54)]. Los picos de la magnetización ocurren cuando $\psi_{\eta,s} = n$, es decir, para los campos

$$\frac{1}{B_{n,\eta,s}} = \frac{n}{\omega_{\eta s}} - \Delta_{\eta s}, \quad (4.94)$$

donde $\omega_{\eta s}$ y $\Delta_{\eta s}$ son las frecuencias y fases

$$\omega_{\eta s} = \frac{\mu^2 - (s\lambda_{SO} - \eta el E_z)^2}{\alpha^2} \quad (4.95)$$

$$\Delta_{\eta s} = \frac{2s_i\mu\mu_B}{\mu^2 - (s\lambda_{SO} - \eta el E_z)^2}. \quad (4.96)$$

Ahora bien, siendo $\eta = +1$ (-1) y $s = +1$ (-1) para el valle K (K') y espín up (down), se tiene

$$\omega_{K\uparrow} = \omega_{K'\downarrow}, \quad \omega_{K\downarrow} = \omega_{K'\uparrow} \quad (4.97)$$

$$\Delta_{K\uparrow} = -\Delta_{K'\downarrow}, \quad \Delta_{K'\uparrow} = -\Delta_{K\downarrow}. \quad (4.98)$$

Por lo tanto solo hay 2 únicas frecuencias y fases. Cabe destacar que, bajo las condiciones asumidas, los picos solo ocurren si $\omega_{\eta s} > 0$. En efecto, tener en cuenta que la ec. (4.95) fue obtenida de la ec. (4.93) considerando B_1 y B_2 tales que $\varepsilon_1 = \mu = \varepsilon_2$, con $n_2 > n_1$. Luego, si $\omega_{\eta s} < 0$ entonces $\mu^2 < (s\lambda_{SO} - \eta el E_z)^2$, lo cual para $\mu_B B/\mu \ll 1$ implica $2\varepsilon_i s\mu_B > \alpha^2 n_i$. Por lo tanto tenemos $2(\varepsilon_2 - \varepsilon_1) s\mu_B > \alpha^2 (n_2 - n_1)$, pero $\varepsilon_2 - \varepsilon_1 = 0$, por lo que $0 > \alpha^2 (n_2 - n_1)$. Este resultado implica que $n_2 < n_1$, lo cual está en contradicción con la suposición inicial $n_2 > n_1$.

Las amplitudes de las OM, para cada valle y espín, se obtienen de la ec. (4.21), con la degeneración $D = \mathcal{A}B\phi$. Derivando los niveles de energía (4.65), y reemplazando $n = \psi_{\eta,s}$ con la ec. (4.93), se obtiene la amplitud de las OM

$$A_{\eta s} = \frac{1}{2\phi} \left[\frac{(s\lambda_{SO} - \eta el E_z)^2}{\mu + s\mu_B B} - \mu + s\mu_B B \right] \simeq -\frac{1}{2\phi} \frac{\alpha^2 \omega_{\eta s}}{\mu}, \quad (4.99)$$

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

donde en la última aproximación consideramos $\mu_B B/\mu \ll 1$. Notar, nuevamente, que si $\lambda_{SO} = 0 = l$ se tiene $\omega_{\eta s} = (\mu/\alpha)^2$ y entonces $A_{\eta s} \rightarrow -\mu/2\phi$, que es la mitad de la amplitud en grafeno, ignorando el DEⁱ. El hecho de que sea la mitad es porque el resultado es para cada valle, de manera que considerando la doble degeneración de valle (al tomar $\lambda_{SO} = 0 = l$), se obtiene la amplitud correcta dada por la ec. (4.56).

Halladas entonces la amplitud y la fase de las OM, ya podemos escribir la contribución SO a las OM. En función de $\omega_{\eta s}$ y $\Delta_{\eta s}$, la ec. (4.93) se puede escribir $\psi_{\eta,s} = \omega_{\eta s} (B^{-1} + \Delta_{\eta s})$, de manera que

$$M_{SO} = \sum_{\eta,s=\pm 1} A_{\eta s} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi p} \operatorname{sen} \left[2\pi p \omega_{\eta s} \left(\frac{1}{B} + \Delta_{\eta s} \right) \right], \quad (4.100)$$

La amplitud de la siguiente contribución, la serie coseno, se obtiene de la ec. (4.25), considerando la expresión $A_{\eta s} \simeq -\alpha^2 \omega_{\eta s}/2\phi\mu$. Con esta aproximación (que ignora el efecto despreciable del DE en la amplitud de las OM), la amplitud $A_{\eta s}$ no depende de B . Luego, como $\psi_{\eta,s}^{(1)} = -\omega_{\eta s}/B^2$ y $\psi_{\eta,s}^{(2)} = 2\omega_{\eta s}/B^3$, se obtiene

$$A_{\eta s}^{cos} = A_{\eta s} \frac{B}{\omega_{\eta s}}, \quad (4.101)$$

En consecuencia, la expresión total de las OM queda

$$M_{osc} = M_{SO} + \sum_{\eta,s=\pm 1} A_{\eta s} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{(\pi p)^2} \cos \left[2\pi p \omega_{\eta s} \left(\frac{1}{B} + \Delta_{\eta s} \right) \right]. \quad (4.102)$$

De manera similar a como sucede en grafeno, la ec. (4.102) se puede simplificar notado que en general la serie coseno es mucho más pequeña que la serie seno, en el caso de μ suficientemente grande para que el efecto del DE sea apreciable en las OM (ver sección 4.2.2.1, en especial la Fig. 4.4). Como estimación de esta justificación, se puede analizar la relación entre las amplitudes $A_{\eta s}^{cos}/A_{\eta s} = B/\omega_{\eta s}$. Considerando que para todos los materiales 2D usualmente se tiene $\alpha \sim 10 \text{ meV}/\sqrt{\text{T}}$ (ver Tabla 3.1), que el DE es observable para $\mu \sim 10^2 \text{ meV}$ (igual que en grafeno), y que $|s\lambda_{SO} - \eta e l E_z| \sim 10 \text{ meV}$, entonces $A_{\eta s}^{cos}/A_{\eta s} \sim 10^{-2} B [\text{T}]$. Así, a no ser que B sea muy grande, podemos despreciar la serie coseno en la ec. (4.102).

Para finalizar, resulta conveniente reescribir las OM separando los picos con frecuencias $\omega_1 = \omega_{K\uparrow} = \omega_{K'\downarrow}$ y $\omega_2 = \omega_{K\downarrow} = \omega_{K'\uparrow}$, y fases $\Delta_1 = \Delta_{K\uparrow} = -\Delta_{K'\downarrow}$ y $\Delta_2 = \Delta_{K'\uparrow} = -\Delta_{K\downarrow}$, según lo indicado en las ec. (4.97) y (4.98). De esta manera las OM en el estado fundamental

ⁱAquí ya estamos ignorando el efecto del DE en la amplitud de las OM, lo cual ya vimos en grafeno que es una buena aproximación (ver sección 4.2.2.1). El efecto del DE se retiene solo en la fase de las OM. En todo caso, de ser necesario considerar la pequeña diferencia de amplitud en $A_{\eta s}$ debido al DE, solo hay reemplazar la expresión general de $A_{\eta s}$ en la ec. (4.99).

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

quedan

$$M_{osc} = \sum_{i=1,2} \frac{A_i}{\pi} \sum_{s=\pm 1} \arctan \left\{ \cot \left[\pi \omega_i \left(\frac{1}{B} + s \Delta_i \right) \right] \right\}, \quad (4.103)$$

donde

$$A_i = - \frac{e}{2h} \frac{\alpha^2 \omega_i}{\mu} \quad (4.104)$$

$$\omega_i = \frac{\mu^2 - \left[\lambda_{SO} + (-1)^i e l E_z \right]^2}{\alpha^2} \quad (4.105)$$

$$\Delta_i = \frac{2\mu\mu_B}{\alpha^2 \omega_i}. \quad (4.106)$$

En resumen, las OM consisten de 4 tipos de picos, con dos únicas frecuencias y fases. Este resultado generaliza el caso de grafeno, de forma que la ruptura en la degeneración de valle se observa en las OM como un fenómeno de batido entre dos frecuencias fundamentales. A su vez generaliza la ec. (1.7) obtenida por Tabert *et al.*^[88] al ignorar el DE.

4.3.2.1. Frecuencias de oscilación

Los valores de las frecuencias ω_1 y ω_2 , y las fases Δ_1 y Δ_2 , dependen de las propiedades de los materiales 2D, tales como la interacción espín-órbita λ_{SO} , la altura del *buckling* l y la velocidad de Fermi v_F , como también de la energía de Fermi μ (potencial químico) y el campo eléctrico perpendicular E_z . Por lo tanto, estos parámetros definen las condiciones para los cuales los picos pueden ocurrir, puesto que esto implica $\omega > 0$. En grafeno, la altura de *buckling* es nula y la IEO es despreciable, de manera que existe una única frecuencia $\omega = (\mu/\alpha)^2$, y dos picos con una diferencia de fase $\Delta = 2\mu\mu_B/\omega\alpha^2 = 2\mu_B/\mu$; la condición $\omega > 0$ simplemente implica $\mu > 0$. Para los demás materiales 2D con *buckling*, la condición $\omega > 0$ implica $\mu^2 > (\lambda_{SO} \pm e l E_z)^2$, de manera que tenemos las regiones indicadas en la Fig. 4.12, correspondiente a estanoeno (donde $\lambda_{SO} = 0,1$ eV).

Dependiendo del valor de μ a un dado campo eléctrico, tres posibilidades pueden ocurrir: (I) $\omega_1 > 0$ y $\omega_2 > 0$, por lo que los 4 picos están presentes; (II) $\omega_1 > 0$ y $\omega_2 < 0$, por lo que solo dos picos con frecuencia ω_1 y diferencia de fase Δ_1 están presentes; (III) $\omega_1 < 0$ y $\omega_2 < 0$ de manera que no hay picos y por lo tanto OM. Notar que ω_2 siempre decrece al incrementarse E_z , mientras que ω_1 crece al incrementarse E_z para $e l E_z < \lambda_{SO}$, toma el máximo valor en $e l E_z = \lambda_{SO}$ (donde $\omega_1 = \mu^2/\alpha^2$ como en grafeno), y luego decrece al incrementarse E_z para $e l E_z > \lambda_{SO}$.

Esta relación entre las OM y $\omega > 0$ se puede entender mejor si analizamos los cambios de niveles de energía que producen las oscilaciones. Primero que nada, para μ constante tenemos los niveles de energía $\varepsilon_i = [\mu^2 + \alpha^2 (nB - \omega_i)]^{1/2} - s\mu_B B$ asociados con ω_i , dada

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

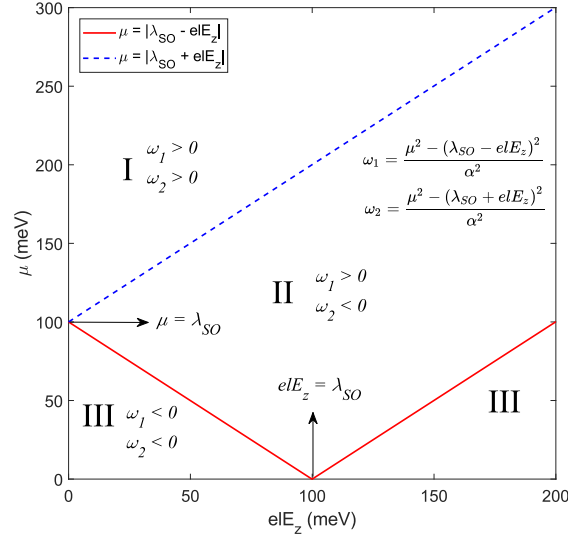


Figura 4.12: Espectro de frecuencias para las OM en estano, como función del campo eléctrico perpendicular E_z y el potencial químico μ . La ruptura de la degeneración de valle, debido a E_z , resulta en dos frecuencias ω_1 y ω_2 para las OM. Las oscilaciones solo ocurren si $\omega > 0$, lo cual define las tres secciones mostradas: (I) $\omega_1 > 0$ y $\omega_2 > 0$, (II) $\omega_1 > 0$ y $\omega_2 < 0$, y (III) $\omega_1 < 0$ y $\omega_2 < 0$.

por la ec. (4.105). Luego $\omega_i < 0$ implica $(\varepsilon_i + s\mu_B B)^2 > \mu^2 + n\alpha^2 B$, y el último nivel de energía ocupado satisface $\varepsilon_i < \mu$. Así, dado que en general $\mu_B B/\mu \ll 1$, para $B > 0$ (manteniendo la dirección del campo magnético), tenemos que ε_i nunca se ocupa si $\omega_i < 0$, no habiendo entonces oscilación asociada con un cambio de ε_i . Para el caso particular de (II) en la Fig. 4.12, tenemos $(\lambda_{SO} - elE_z)^2 < \mu^2 < (\lambda_{SO} + elE_z)^2$, y el último NL n ocupado en ε_1 satisface $(\lambda_{SO} - elE_z)^2 + n\alpha^2 B < (\lambda_{SO} + elE_z)^2 < (\lambda_{SO} - elE_z)^2 + (n+1)\alpha^2 B$. Luego, cuando $\omega_1 > 0$ y $\omega_2 < 0$, ε_2 no está ocupado y hay $n = \text{floor}[(\omega_1 - \omega_2)/B]$ NL ocupados en ε_1 . Notar que n depende B , con un valor que depende de la relación entre la diferencia de frecuencia y el campo magnético. Eso es de esperar considerando que la magnetización oscila como función de $1/B$.

4.3.2.2. Batido de frecuencias

En el caso general, cuando ambas frecuencias están presentes, las OM presentan un patrón de interferencia, producido por la superposición de M_1 y M_2 , siendo ambas SO. El patrón de interferencia depende de cómo son los valores de ω_1 y ω_2 . La situación más interesante ocurre cuando ω_1 y ω_2 tienen valores cercanos, en cuyo caso se observa un fenómeno de batido en las OM. Dado que siempre $\omega_1 > \omega_2$, la condición de batido es $(\omega_1 - \omega_2)/\omega_1 \ll 1$. De la ec. (4.105), la condición de batido implica

$$\frac{4\lambda_{SO}elE_z}{\mu^2 - (\lambda_{SO} - elE_z)^2} \ll 1. \quad (4.107)$$

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

Solo para energías de Fermi μ y campos eléctricos elE_z que satisfacen la ec. (4.107), se produce un batido en las OM. En la Fig. 4.13 graficamos $(\omega_1 - \omega_2)/\omega_1$, en el caso de siliceno, para diferentes valores de μ , como función del campo eléctrico perpendicular.

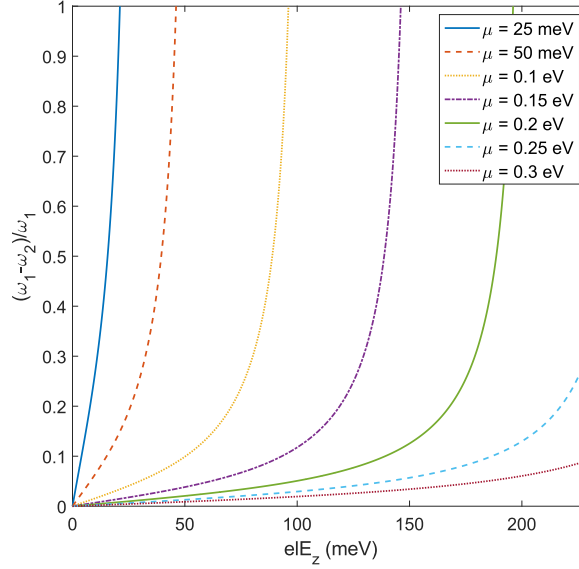


Figura 4.13: Para siliceno, gráfico de $(\omega_1 - \omega_2)/\omega_1$ como función del campo eléctrico perpendicular E_z , para diferentes valores de μ . Hay fenómeno de batido en las OM solo si $(\omega_1 - \omega_2)/\omega_1 \ll 1$.

Se observa que mientras menor es μ , menor es el rango de campo eléctrico para el cual la ec. (4.107) se satisface. En la práctica, un fenómeno de batido se observa claramente siempre que $(\omega_1 - \omega_2)/\omega_1 \lesssim 0,1$. Para el ejemplo de siliceno esto implica que para $\mu = 0,1$ eV no hay un batido en las OM si $elE_z \gtrsim 0,1$ eV. En la región para la cual la ec. (4.107) no se satisface, existe de todas maneras una interferencia entre las OM con frecuencias ω_1 y ω_2 , salvo que no se vería como un fenómeno de batido. En cambio, las OM muestran un patrón que parece más aleatorio, donde el perfil de las OM depende de los valores específicos de ω_1 y ω_2 . Esto puede observarse en la Fig. 4.14, donde graficamos las OM en siliceno para $\mu = 0,2$ eV, con (a) $elE_z = 70$ meV y (b) $elE_z = 180$ meV.

Este cambio drástico en el comportamiento de las OM puede explicarse teniendo en cuenta cómo están ordenados los niveles de energía en cada caso, de manera similar a como se hizo en el caso de N constante. Cuando $(\omega_1 - \omega_2)/\omega_1 \ll 1$, ω_1 y ω_2 tienen valores cercanos y por lo tanto también tienen valores cercanos los respectivos niveles de energía $\varepsilon_{i,n}$ (para el mismo valor de NL n) que dan lugar a estas frecuencias, como ya fue discutido arriba. Así, los cambios en el último nivel ocupado (el cual produce las OM) sigue un patrón ordenado que intercambia $\varepsilon_{1,n}$ y $\varepsilon_{2,n}$ al variar el campo magnético B . En cambio, cuando ω_1 y ω_2 no tienen valores cercanos, tal que $(\omega_1 - \omega_2)/\omega_1 \ll 1$ no se satisface, entonces los niveles de energía

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

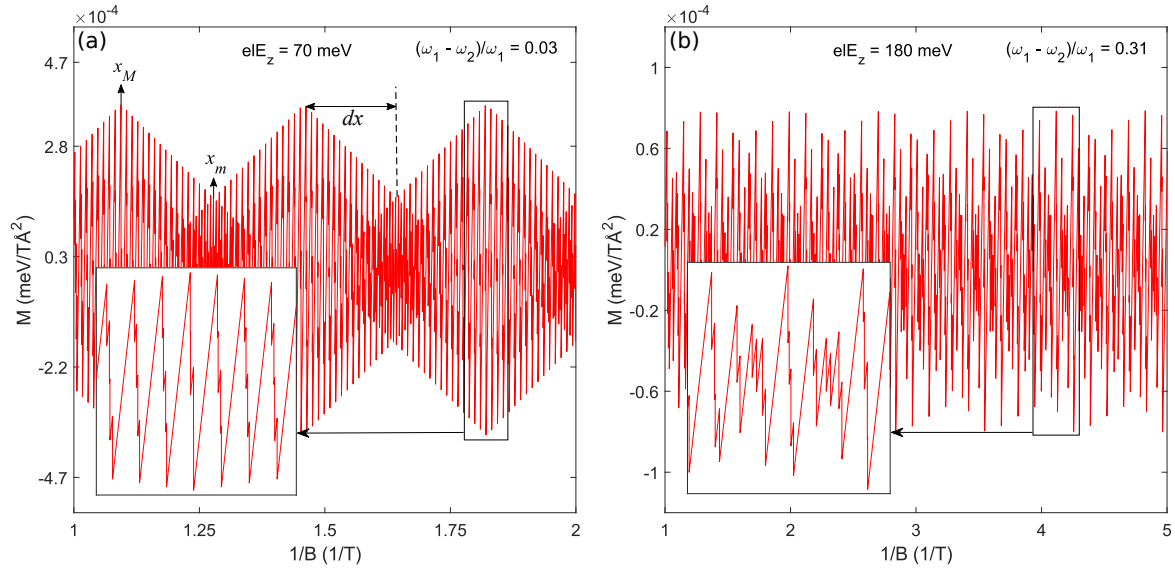


Figura 4.14: OM en siliceno, para $\mu = 0,2$ eV, con (a) $elE_z = 70$ meV y $(\omega_1 - \omega_2)/\omega_1 = 0,03$ y (b) $elE_z = 180$ meV y $(\omega_1 - \omega_2)/\omega_1 = 0,31$. Solo en (a) se observa un fenómeno de batido, consistente con la condición $(\omega_1 - \omega_2)/\omega_1 \ll 1$.

$\varepsilon_{1,n}$ y $\varepsilon_{2,n}$ no son cercanos y no existe, por tanto, un claro patrón de cómo cambia el último nivel ocupado. En esta región, el ordenamiento de los niveles de energía depende del valor de E_z y B , dando lugar a un patrón que parece aleatorio en las OM (ver zoom en la Fig. 4.14). De todas maneras, si uno analiza en detalle el ordenamiento de los niveles de energía, como se realizó en la sección 4.3.1.4 para el caso N constante, entonces el comportamiento de las OM pueden explicarse en detalle.

En la situación de que existe un fenómeno de batido en las OM, el mismo presenta un patrón tipo rombo, como se observa en la Fig. 4.14(a). Esto se debe, naturalmente, a las SO M_1 y M_2 en el estado fundamental. Si nos restringimos a unos pocos valores de campo magnético (i.e. pocos picos de magnetización), uno puede apreciar en detalle el perfil de las OM, como se muestra en el área con zoom. En dicha región se observan claramente los 4 tipos picos en las OM, con su amplitud y fase determinadas por el cambio de valle y espín en el último nivel ocupado. Para el fenómeno de batido, el máximo absoluto $1/B_M \equiv x_M$, indicado en la figura, ocurre cuando hay una interferencia constructiva. Esto implica $x_M = m_1/\omega_1 \pm \Delta_1 = m_2/\omega_2 \pm \Delta_2$, donde m_1 y m_2 son dos enteros tales $m_2 = m_1 + n$. A su vez, los mínimos absolutos $1/B_m \equiv x_m$ ocurren entre dos máximos de batido. En consecuencia, puesto que $\omega\Delta \ll 1$, los máximos y los mínimos de batido ocurren para

$$x_M = \frac{n}{(\omega_1 - \omega_2)} \quad (4.108)$$

$$x_m = \frac{n + 1/2}{(\omega_1 - \omega_2)}, \quad (4.109)$$

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

donde n es un entero positivo. Teniendo en cuenta la ec. (4.105), el ancho del batido $dx = (\omega_1 - \omega_2)^{-1}$ es

$$dx = \frac{\hbar v_F^2}{4\lambda_{SO} l E_z}. \quad (4.110)$$

De esta manera, uno puede obtener información sobre los parámetros del material 2D midiendo cómo es el ancho del fenómeno de batido en las OM. Notar que $(\omega_1 - \omega_2)^{-1}$ no depende del campo magnético ni del potencial químico, solo del campo eléctrico perpendicular E_z . Esto es de esperar, puesto que el ancho depende de la diferencia de frecuencias de los picos debido al campo eléctrico.

4.3.3. Comparación entre los casos N o μ constante

La ruptura de la degeneración de valle en los materiales 2D con *buckling*, debido a la presencia del campo eléctrico perpendicular, da lugar a la aparición de nuevas oscilaciones en la magnetización. En el caso N constante, se vio que las nuevas oscilaciones dependen fundamentalmente de cómo es el ordenamiento de los niveles de energía, lo cual determina su amplitud. En el caso μ constante, se vio que las OM dependen de la interferencia de dos frecuencias de oscilación que surgen debido a la dependencia de los niveles con el valle. Comparando ambos casos, las mismas propiedades discutidas ya en grafeno (sección 4.2.3) siguen siendo válidas en los materiales 2D con *buckling*, con la inclusión de los nuevos picos de magnetización. Es decir, en el caso N constante la variable fundamental de las oscilaciones es la amplitud de las mismas, mientras que en el caso μ constante la variable fundamental es la frecuencia de las oscilaciones. En los materiales 2D, esta característica se ve reflejada en el fenómeno de batido de las OM.

4.3.3.1. Fenómeno de batido

Ya vimos que en el caso μ constante el batido de las OM se describe fácilmente a través de la interferencia entre las dos frecuencias de oscilación. Naturalmente, es de esperar que dicho fenómeno de batido también suceda para el caso N constante. Sin embargo, la causa del mismo depende de la amplitud de las discontinuidades en la magnetización, y no del periodo de las oscilaciones. Así, el batido de las OM para el caso N constante surge debido a que las amplitudes de las oscilaciones, y los tipos de picos, cambian significativamente al variar el campo magnético. Dicho cambio es, como ya hemos visto, debido a la variación en el ordenamiento de los niveles de energía. Por esta razón no es tan simple describir este fenómeno de batido para el caso N constante, en comparación con el caso μ constante. En otras palabras, para describir analíticamente el batido de las OM para N constante, uno debería analizar cómo va cambiando el ordenamiento de los niveles de energía al variar el campo magnético.

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

Para tener una idea cualitativa de esto, consideraremos las OM en siliceno para N constante, considerando los valores de la Fig. 4.14(a). Asumimos la relación entre μ y n_e como la tomada previamente para grafeno, es decir, $\mu = (\alpha/2) \sqrt{n_e \phi}$. En siliceno, para $\mu = 0,2$ eV, la relación implica una densidad electrónica $n_e \simeq 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. Puesto que, al variar el campo magnético, no se mantiene un único ordenamiento, entonces el análisis lo realizamos de manera numérica, considerando las OM a N constante dadas por la ec. (4.4). El resultado se observa en la Fig. 4.15 para siliceno, con $n_e = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ y $elE_z = 70 \text{ meV}$, donde en (a) graficamos los parámetros n_q , η_q y s_q del último nivel ocupado ε_q , y en (b) la magnetización.

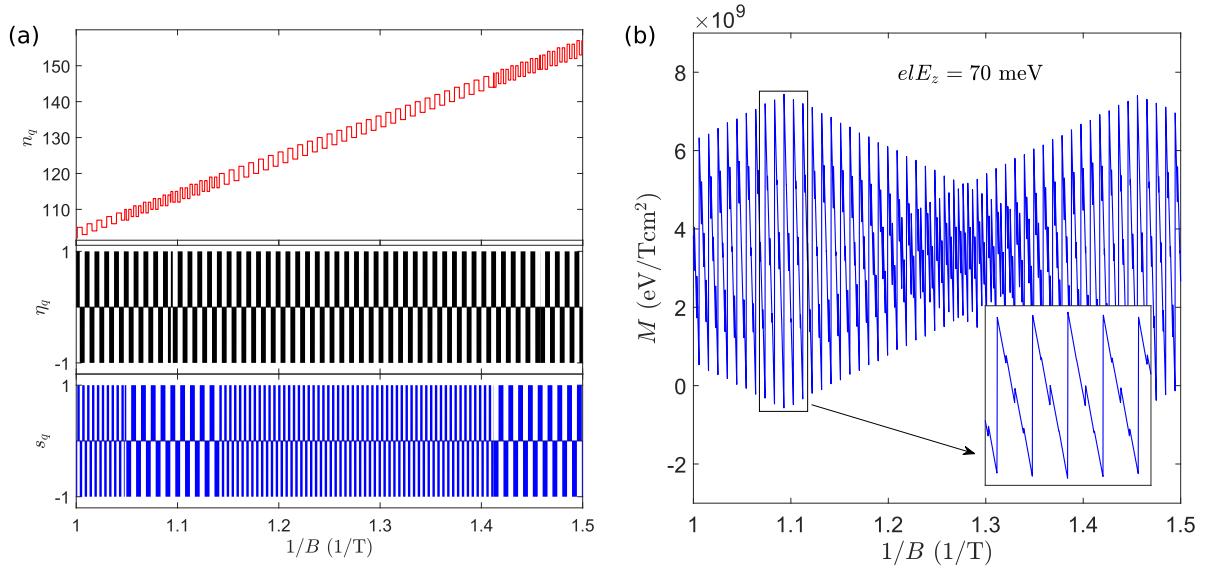


Figura 4.15: Para N constante en siliceno, con $n_e = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ y $elE_z = 70 \text{ meV}$: (a) variación de los parámetros n_q , η_q y s_q del último nivel ocupado ε_q , (b) magnetización dada por la ec. (4.4).

Claramente se observa un fenómeno de batido en las OM, con prácticamente el mismo perfil que se observa en el caso μ constante, en la Fig. 4.14(a). Es decir, el batido se ve como un rombo debido a la interferencia de las SO en el estado fundamental. El origen del fenómeno de batido se infiere del ordenamiento de los niveles de energía observado en la Fig. 4.15(a). Vemos que el orden de los parámetros varía alrededor del máximo de batido; esto se observa principalmente en el cambio de variación con B de los índices n_q y s_q . Así, el fenómeno de batido a N constante surge de la variación en la amplitud de los picos al variar el orden de los niveles de energía. La transición alrededor del máximo de batido se observa en el zoom de la Fig. 4.15(b), donde la amplitud de los pequeños picos decrece a cero y luego vuelve a aumentar.

El hecho de que el perfil de batido de las OM para N constante sea prácticamente el mismo que para el caso μ constante, implica que en buena aproximación los máximos y mínimos del batido en ambos casos, así como su ancho, están dados por las ec. (4.108)-

4. Oscilaciones magnéticas en el estado fundamental

(4.110). Este resultado será útil al analizar el efecto de la temperatura en el fenómeno de batido de las OM (capítulo siguiente), que se realiza solo para el caso μ constante. Así, en buena aproximación la envolvente de las OM es la misma para los casos N o μ constante, aún cuando las oscilaciones propias (internas) que causan el batido sean diferentes.

Capítulo 5

Oscilaciones magnéticas con decaimiento

Los efectos de la temperatura e impurezas (los cuales describiremos, de aquí en adelante, como efectos de *decaimiento*), tienden a reducir la amplitud de las OM. Tradicionalmente, los efectos de decaimiento en los metales 3D son descritos usando la fórmula LK, donde a temperaturas accesibles las OM pueden describirse considerando solo los primeros armónicos en la serie. Sin embargo, esto no es factible a bajo decaimiento en los materiales 2D, puesto que las OM en el estado fundamental son discontinuas. Esto implica que cuando la reducción de las OM es pequeña, varios armónicos son necesarios para que la serie LK converja.

En este capítulo se desarrolla una formulación alternativa a la fórmula LK, la cual describe las OM a bajo decaimiento como una modificación de las oscilaciones en el estado fundamental. Se verá que con esta formulación resulta más simple tratar el decaimiento de muchas de las propiedades únicas que se reflejan en las OM de los materiales 2D en el estado fundamental, como fue estudiado en el capítulo anterior. Cuando el decaimiento es alto y la situación es similar a lo que ocurre en los metales 3D, la fórmula LK vuelve a ser de igual conveniencia. De esta manera, en el caso general, la descripción del decaimiento de las OM depende de la situación, y un enfoque u otro podría resultar más conveniente.

5.1. Formulación general

En esta sección se realiza una descripción general del decaimiento de las OM, teniendo en cuenta los efectos de la temperatura e impurezas. Se considerará un sistema bidimensional sujeto a un campo magnético perpendicular B , resultando en niveles de Landau $\varepsilon_{n,\gamma}(B; X)$. Dicho sistema es el mismo con el cual se desarrolló la formulación general en el estado fundamental (sección 4.1), utilizando la misma descripción de los niveles de Landau (sección 4.1.1). Ahora bien, al tratar el efecto de la temperatura e impurezas, debe tenerse en cuenta

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

que el desarrollo analítico solo es factible al considerar μ constante y trabajar en el ensamble gran canónico^[153,154]. Esto elimina la necesidad de mantener la densidad electrónica constante, lo cual no es prácticamente posible (desde el punto analítico, como formulación general) al trabajar en el ensamble canónico. En consecuencia, la siguiente formulación general del efecto del decaimiento en las OM será realizada asumiendo siempre μ constante. El caso N constante se obtiene entonces de manera usual a como se realiza en la descripción de un gas cuántico: obteniendo μ tal que N sea constante, lo cual implica que μ oscila con el campo magnético^[83,89,90]. Más aún, debido a los efectos de decaimiento, es de esperar que μ también dependa de la temperatura y las impurezas al considerar dicho caso.

Esta especie de ruptura en la descripción analítica del decaimiento solo para el caso μ constante, mientras que en el estado fundamental se dio una descripción analítica para ambos casos N o μ constante, no debe ser considerada restrictiva. De hecho, uno podría asumir lo mismo en el estado fundamental, realizando una descripción solo para μ constante y luego considerar el caso N constante por medio de las oscilaciones del potencial químico. El resultado sería, en principio, el mismo, aunque se perdería gran parte del análisis analítico que uno puede hacer al considerar directamente el caso N constante. Dicho estudio analítico, para el caso N constante en el estado fundamental, será muy útil a la hora de entender las OM con decaimiento. En efecto, veremos que a bajo decaimiento se retienen los detalles finos de las OM, tales como el mezclado de valle y espín que dan lugar a pequeñas oscilaciones. Así, provisto del conocimiento de los picos de las OM en el estado fundamental, uno puede fácilmente interpretar las OM decaimiento en el caso N constante: no son otra cosa que el decaimiento de las discontinuidades en las OM en el estado fundamental.

5.1.1. Gran potencial y magnetización

En lo que sigue trabajaremos entonces en el ensamble gran canónico, asumiendo un potencial químico μ constante. El caso N constante, obtenido con la correspondiente variación de μ , será considerado al final. Para realizar una formulación general, consideraremos el efecto de las impurezas, u otras imperfecciones de la red, a través del ensanchamiento de la densidad de estados (DOS) de cada nivel de energía $\varepsilon_{n;\gamma}$. Así, cada nivel $\varepsilon_{n;\gamma}$ tiene una DOS $\rho_{n;\gamma}(\varepsilon, \varepsilon_{n;\gamma}, \Gamma_{n;\gamma})$, donde $\Gamma_{n;\gamma}$ es el parámetro que define el ensanchamientoⁱ. En general, el parámetro $\Gamma_{n;\gamma}$ puede depender de las mismas variables e índices que los niveles de energía $\varepsilon_{n;\gamma}$. Vale destacar que en el caso prístino $\rho_{n;\gamma}(\varepsilon, \varepsilon_{n;\gamma}, \Gamma_{n;\gamma}) \rightarrow \delta(\varepsilon - \varepsilon_{n;\gamma})$, donde δ es la delta

ⁱEste parámetro $\Gamma_{n;\gamma}$ proviene, por supuesto, del tiempo de *scattering* $\tau_{n;\gamma}$ de los electrones con las impurezas, en presencia de un campo magnético. De todos modos, no nos interesa aquí cómo es esta relación (que depende del complejo mecanismo de *scattering* en un campo magnético), sino simplemente la descripción general, sin asumir cómo es o de dónde proviene $\Gamma_{n;\gamma}$. En otras palabras, solo nos interesará la descripción del decaimiento de las OM en función del valor de $\Gamma_{n;\gamma}$, y del tipo de ensanchamiento $\rho_{n;\gamma}$.

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

de Dirac. De esta manera, teniendo en cuenta la ec. (2.8), el gran potencial del sistema es

$$\Omega = -k_B T D \sum_{n;\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{n;\gamma} \ln [1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon)}] d\varepsilon. \quad (5.1)$$

Notar que estamos separando la degeneración D del ensanchamiento ρ de los niveles de energía; la DOS total sería $D\rho$. Considerando los niveles de energía ordenados ε_r , podemos separar $\Omega = \sum_r \Omega_r$, con $\rho_r(\varepsilon, \varepsilon_r, \Gamma_r)$. Luego, para cada r se tiene

$$\left(\frac{\partial \Omega_r}{\partial B} \right)_\mu = \frac{\Omega_r}{B} - D k_B T \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \rho_r}{\partial B} \ln [1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon)}] d\varepsilon, \quad (5.2)$$

donde se utilizó $\partial D / \partial B = D/B$, considerando $D = \lambda \mathcal{A} B / \phi$. Ahora bien, asumiremos que la DOS ρ_r , para cada nivel de energía, es simétrica alrededor de ε_r , tal que $\partial \rho_r / \partial \varepsilon_r = -(\partial \rho_r / \partial \varepsilon)$. Notar que esto es el caso en las distribuciones usuales de Lorentz, Gauss o semi-elípticas. Considerando que Γ_r puede también depender de B , la última integral en la ec. (5.2) resulta

$$-\frac{\partial \varepsilon_r}{\partial B} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \rho_r}{\partial \varepsilon} \ln [1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon)}] d\varepsilon + \frac{\partial \Gamma_r}{\partial B} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \rho_r}{\partial \Gamma_r} \ln [1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon)}] d\varepsilon, \quad (5.3)$$

e integrando por partes

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \rho_r}{\partial \varepsilon} \ln [1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon)}] d\varepsilon = \beta \int_{-\infty}^{\infty} \rho_r \frac{1}{1 + e^{-\beta(\mu-\varepsilon)}} d\varepsilon. \quad (5.4)$$

Por lo tanto, de las ec. (5.2), (5.3) y (5.4) se obtiene

$$\left(\frac{\partial \Omega_r}{\partial B} \right)_\mu = I_{1,r} + I_{2,r} + I_{3,r}, \quad (5.5)$$

donde definimos

$$I_{1,r} = -\frac{D}{B} k_B T \int_{-\infty}^{\infty} \rho_r \ln [1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon)}] d\varepsilon \quad (5.6)$$

$$I_{2,r} = D \frac{\partial \varepsilon_r}{\partial B} \int_{-\infty}^{\infty} \rho_r \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon-\mu)}} d\varepsilon \quad (5.7)$$

$$I_{3,r} = -\frac{D}{\beta} \frac{\partial \Gamma_r}{\partial B} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \rho_r}{\partial \Gamma_r} \ln [1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon)}] d\varepsilon. \quad (5.8)$$

A partir de aquí vamos a primero considerar los efectos de decaimiento como una modificación a las OM en el estado fundamental, lo cual dependerá de la ocupación de los NL. Luego

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

probaremos que esto es equivalente a describir los efectos de decaimiento a través de factores de reducción, como en la fórmula LK.

5.1.2. Efectos de decaimiento en función de los NL

La idea es describir las OM con decaimiento como una modificación a las OM en el estado fundamental. Esto naturalmente resultará conveniente a bajo decaimiento, donde las OM mantienen, en gran medida, el mismo perfil que en el estado fundamental. De la ec. (5.5), sumando sobre r y considerando la expresión de Ω en el estado fundamental [ec. (4.17)], podemos separarⁱ

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial\Omega}{\partial B}\right) &= \left(\frac{\partial\Omega^0}{\partial B}\right) + \sum_{r=1}^{\infty} I_{3,r} + \sum_{r=1}^f \left[I_{1,r} - \frac{D}{B} (\varepsilon_r - \mu) \right] \\ &+ \sum_{r=f+1}^{\infty} I_{1,r} + \sum_{r=1}^f \left[I_{2,r} - D \frac{\partial\varepsilon_r}{\partial B} \right] + \sum_{r=f+1}^{\infty} I_{2,r}, \end{aligned} \quad (5.9)$$

donde Ω^0 es el gran potencial en el estado fundamental, y f es la última posición ordenada tal que $\varepsilon_f \leq \mu < \varepsilon_{f+1}$, como se consideró en el capítulo anterior. En el apéndice A de este capítulo mostramos que, a bajo decaimiento tal que $\beta\mu \gg 1$ y $\mu/\Gamma \gg 1$, podemos despreciar los términos con $I_{1,r}$ y $I_{3,r}$ en la expansión anteriorⁱⁱ.

Ahora bien, como en el capítulo anterior para las OM en el estado fundamental, conviene volver a la formulación general de los niveles de Landau (sección 4.1.1) y separar las OM por los índices γ . Cabe recordar que esto es posible puesto que el ordenamiento de los niveles de energía es provisto por el potencial químico constante, quien determina en qué orden se producen las oscilaciones a través de la condición $\varepsilon_{n;\gamma} = \mu$; esta cualidad no es alterada por los efectos de decaimiento. Así, para cada índice γ , la posición final en la ec. (5.9), determinada por $\varepsilon_{f_\gamma;\gamma} \leq \mu < \varepsilon_{f_\gamma+1;\gamma}$, se puede obtener fácilmente de la función ψ_γ como $f_\gamma = \text{floor}[\psi_\gamma]$ [ver ec. (4.20)]. Definimos el factor de ocupación $\mathcal{F}_{n;\gamma}$, para cada nivel de energía $\varepsilon_{n;\gamma}$, como

$$\mathcal{F}_{n;\gamma} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{n;\gamma} \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu)}} d\varepsilon. \quad (5.10)$$

A bajo decaimiento el factor de ocupación $\mathcal{F}_{n;\gamma}$ solo cambia (relativo a su valor en el estado fundamental) cuando $\varepsilon_{n;\gamma}$ está cerca de μ . Por lo tanto es buena aproximación expandir cada

ⁱPara simplificar la notación, de aquí en adelante omitiremos el subíndice μ en las derivadas, entendiéndose que deben hacerse considerando μ constante.

ⁱⁱEsta condición de bajo decaimiento no debe considerarse como una aproximación restrictiva, puesto que desde el punto de vista práctico es, de hecho, una condición para que el decaimiento sea lo suficientemente pequeño para observar las OM. Más aún en el caso de bajo decaimiento, donde interesa que la reducción de las OM sea suficientemente pequeño tal que se observen los detalles del DE y el mezclado de valle, como fue descrito en el capítulo anterior.

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

$\varepsilon_{n;\gamma}$ alrededor de $n = \psi_\gamma$ (puesto que $\varepsilon_{n=\psi_\gamma;\gamma} = \mu$), y tomar

$$D \frac{\partial \varepsilon_{n;\gamma}}{\partial B} = -\mathcal{A}A_\gamma, \quad (5.11)$$

donde A_γ es la amplitud de las SO en el estado fundamental, dada por la ec. (4.21). De esta manera, de las ec. (5.7) y (5.9) se obtiene, para cada índice γ , las OM a bajo decaimiento

$$M_{osc,\gamma} = M_{osc,\gamma}^0 + A_\gamma \sum_{n \leq f_\gamma} (\mathcal{F}_{n;\gamma} - 1) + A_\gamma \sum_{n > f_\gamma} \mathcal{F}_{n;\gamma}, \quad (5.12)$$

donde $M_{osc,\gamma}^0$ son las OM en el estado fundamental, dadas por la ec. (4.24). Las OM totalesⁱ se obtienen sumando sobre todos los γ . Las OM, tal como se expresan en la ec. (5.12), permiten una simple interpretación. Primero que nada, debe notarse que en el estado fundamental se tiene $\mathcal{F}_{n;\gamma} = 1$ si $n \leq f_\gamma$ y $\mathcal{F}_{n;\gamma} = 0$ si $n > f_\gamma$, de forma que $M_{osc,\gamma} \rightarrow M_{osc,\gamma}^0$, como es de esperar. Con decaimiento no nulo, la ec. (5.12) nos dice que las OM se modifican por la inclusión de los dos últimos términos. Cada uno de estos términos puede pensarse como una reducción de las OM debido a la modificación de los estados ocupados. Esto se determina por el factor de ocupación $\mathcal{F}_{n;\gamma}$ de cada nivel $\varepsilon_{n;\gamma}$, y la correspondiente modificación a las OM a través de la amplitud de oscilación A_γ . En otras palabras, los niveles $n \leq f_\gamma$ (totalmente ocupados en el estado fundamental) son ensanchados y excitados térmicamente, lo cual tiende a vaciarlos, $\mathcal{F}_{n;\gamma} < 1$, cambiando las OM por un factor $A_\gamma (\mathcal{F}_{n;\gamma} - 1)$. Los niveles $n > f_\gamma$ (desocupados en el estado fundamental) también son ensanchados y excitados térmicamente, lo cual tiende a llenarlos, $\mathcal{F}_{n;\gamma} > 1$, cambiando las OM por un factor $A_\gamma \mathcal{F}_{n;\gamma}$.

La ec. (5.12) puede ser reescrita de manera conveniente en diferentes formas, dependiendo de la situación. Por ejemplo, si $\psi_\gamma \gg 1$ tal que $M_{osc,\gamma}^0$ está dado por la ec. (4.27), entonces se pueden usar las propiedades de la función arco tangente para reescribir la ec. (5.12) como (ver apéndice C)

$$M_{osc,\gamma} = \frac{A_\gamma}{\pi} \arctan \left[\cot \left(\pi \psi_\gamma - \pi \sum_n \mathcal{F}_{n;\gamma} \right) \right]. \quad (5.13)$$

Esta expresión es particularmente útil cuando uno está interesado en el perfil general de las OM, cuando se consideran muchas oscilaciones. Por otra parte, cuando uno analiza los efectos de decaimiento sobre cada pico de las OM (es decir, la reducción de cada pico de magnetización en el estado fundamental), es más útil reordenar $M_{osc,\gamma}$ considerando solo los estados cercanos al pico en cuestión, puesto que son éstos quienes principalmente modifican las OM. Por ejemplo, alrededor de un dado pico de magnetización en $\psi_\gamma = n_0$ (n_0 un entero

ⁱTécnicamente no hemos demostrado que el efecto de decaimiento, dado por los dos últimos términos en la ec. (5.12), sean de carácter oscilatorio. Esto lo hacemos en detalle en el apéndice B de este capítulo, donde se demuestra que en la condición de bajo decaimiento, donde la expansión (5.11) es válida, los términos de decaimiento en $M_{osc,\gamma}$ son una función oscilatoria.

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

positivo), es buena aproximación considerar solo los factores $\mathcal{F}_{n;\gamma}$ cercanos a $n = n_0$. Así se puede aproximar

$$M_{osc,\gamma} \simeq M_{osc,\gamma}^0 + A_\gamma \mathcal{F}_{n_0;\gamma} + A_\gamma (\mathcal{F}_{n_0-1;\gamma} + \mathcal{F}_{n_0+1;\gamma} - 1) + \dots \quad (5.14)$$

La aproximación a primer orden es $M_{osc,\gamma} \simeq M_{osc,\gamma}^0 + A_\gamma \mathcal{F}_{n_0;\gamma}$, que es simplemente los efectos de decaimiento debidos solo al nivel $\varepsilon_{n_0;\gamma}$. Éste es siempre el término dominante que modifica las OM alrededor del pico $\psi_\gamma = n_0$. Así, a muy bajo decaimiento, la modificación de las OM alrededor del pico n_0 se puede estudiar analizando solo el factor de ocupación $\mathcal{F}_{n_0;\gamma}$.

5.1.3. Efectos de decaimiento como factores de reducción

En lo que sigue demostraremos que, si el ensanchamiento es el mismo para todos los niveles de Landau (de forma que Γ no depende de n), entonces la ec. (5.12) es equivalente a describir los efectos de decaimiento en las OM como factores de reducción. Empezamos reescribiendo la ec. (5.12) comoⁱ

$$M_\gamma(\mu) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\varepsilon - \mu) M_\gamma^0(\varepsilon) d\varepsilon - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{D}{\mathcal{A}} \frac{\partial \varepsilon_{n;\gamma}}{\partial B} \int_{-\infty}^{\infty} [\mathcal{F}_\gamma - H(\varepsilon - \mu)] \delta(\varepsilon - \varepsilon_{n;\gamma}) d\varepsilon, \quad (5.15)$$

donde $H(\varepsilon - \mu)$ es la función de Heaviside y

$$\mathcal{F}_\gamma = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_\gamma(\varepsilon' - \varepsilon) n_F(\varepsilon' - \mu) d\varepsilon', \quad (5.16)$$

con $n_F(\varepsilon' - \mu) = [1 + e^{\beta(\varepsilon' - \mu)}]^{-1}$ la distribución de Fermi-Dirac. Integrando por partes la segunda integral en la ec. (5.15) resulta

$$M_\gamma(\mu) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\varepsilon - \mu) M_\gamma^0(\varepsilon) d\varepsilon + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{D}{\mathcal{A}} \frac{\partial \varepsilon_{n;\gamma}}{\partial B} \int_{-\infty}^{\infty} [\mathcal{F}'_\gamma + \delta(\varepsilon - \mu)] H(\varepsilon - \varepsilon_{n;\gamma}) d\varepsilon, \quad (5.17)$$

donde

$$\mathcal{F}'_\gamma = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_\gamma(\varepsilon' - \varepsilon) \frac{\partial n_F}{\partial \varepsilon'}(\varepsilon' - \mu) d\varepsilon'. \quad (5.18)$$

Por lo tanto, de la ec. (4.18) (considerando solo la parte oscilatoria) se obtiene

$$M_\gamma(\mu) = - \int_{-\infty}^{\infty} \rho_\gamma(\varepsilon' - \varepsilon) \left(- \frac{\partial n_F}{\partial \varepsilon'} \right) M_\gamma^0(\varepsilon) d\varepsilon d\varepsilon'. \quad (5.19)$$

ⁱNotar que volvemos a la expresión general para la amplitud, i.e. $A_\gamma = -(D/\mathcal{A}) \partial \varepsilon_{n;\gamma} / \partial B$ [ec. (5.11)].

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

De esta manera los efectos de decaimiento se expresan como una convolución a la magnetización en el estado fundamental, lo cual es la base de la fórmula LK (ver sección 2.1.4). De aquí, las OM con factores de reducción se obtiene reemplazando en la ec. (5.19) las SO de $M_\gamma^0(\varepsilon)$, dadas por la ec. (4.22). Esto se realiza en el apéndice D, donde se demuestra que la ec. (5.19) queda

$$M_{osc,\gamma} = A_\gamma \sum_{p=1}^{\infty} R_{T,\gamma}(p) R_{\Gamma,\gamma}(p) \frac{\text{sen}(2\pi p\psi_\gamma)}{\pi p}, \quad (5.20)$$

donde $R_{T,\gamma}(p)$ y $R_{\Gamma,\gamma}(p)$ son los factores de reducción de la temperatura e impurezas, respectivamente, dados por

$$R_{T,\gamma}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[-\frac{\partial n_F}{\partial x}(x) \right] \cos\left(2\pi p x \frac{\partial \psi_\gamma}{\partial \mu}\right) dx. \quad (5.21)$$

$$R_{\Gamma,\gamma}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_\gamma(x) \cos\left(2\pi p x \frac{\partial \psi_\gamma}{\partial \mu}\right) dx. \quad (5.22)$$

La expresión (5.20) para las OM es una generalización de la fórmula LK (ver sección 1.3.3) en 2D, para un sistema con niveles de energía $\varepsilon_{n;\gamma}$. Las OM totales se obtienen sumando sobre todos los índices γ . Vale destacar que en el estado fundamental, sin decaimiento, se tiene $\Gamma = 0 = T$ y $\rho(x) = \delta(x) = -(\partial n_F / \partial x)$, por lo que $R_{T,\gamma}(p) = 1 = R_{\Gamma,\gamma}(p)$ y $M_{osc,\gamma} = M_{osc,\gamma}^0$, como es de esperar. En general, el factor de reducción $R_{T,\gamma}(p)$ tiene siempre la misma expresión. En efecto, de la ec. (5.21) se tiene

$$R_{T,\gamma}(p) = \left(2\pi^2 p k_B T \frac{\partial \psi_\gamma}{\partial \mu} \right) \text{csch} \left(2\pi^2 p k_B T \frac{\partial \psi_\gamma}{\partial \mu} \right), \quad (5.23)$$

que es el conocido factor de reducción de la temperatura en la fórmula LK, generalizado al ser dependiente de ψ_γ . En contraste, la expresión de $R_{\Gamma,\gamma}(p)$ depende de cómo es la distribución de impurezas, es decir, del ensanchamiento de los niveles de Landau. En el apéndice E se obtiene R_Γ para algunas distribuciones comunes.

La ec. (5.20) es particularmente útil cuando la suma infinita se puede resolver (es decir, hay solución analítica), como sucede en algunos casos especiales. Por ejemplo, para una DOS con una distribución de Lorentz, el factor de reducción de impurezas es el conocido factor de Dingle $R_{\Gamma,\gamma}(p) = \exp(-2\pi p \Gamma_\gamma \partial \psi_\gamma / \partial \mu)$ (ver apéndice E), por lo que a temperatura nula la ec. (5.20) resulta

$$\begin{aligned} M_{osc,\gamma} &= A_\gamma \sum_{p=1}^{\infty} \exp(-2\pi p \Gamma_\gamma \partial \psi_\gamma / \partial \mu) \frac{\text{sen}(2\pi p \psi_\gamma)}{\pi p} \\ &= \frac{A_\gamma}{\pi} \arctan \left[\frac{\text{sen}(2\pi \psi_\gamma)}{e^{2\pi \Gamma_\gamma \partial \psi_\gamma / \partial \mu} - \cos(2\pi \psi_\gamma)} \right]. \end{aligned} \quad (5.24)$$

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

Por otro lado, cuando la temperatura es relativamente alta se puede aproximar

$$\operatorname{csch} \left(2\pi^2 p k_B T \frac{\partial \psi_\gamma}{\partial \mu} \right) \simeq 2 \exp \left(-2\pi^2 p k_B T \frac{\partial \psi_\gamma}{\partial \mu} \right), \quad (5.25)$$

de manera que el factor $R_T(p)$ se reduce a una exponencial, similar al factor de Dingle, y entonces la suma infinita de la ec. (5.20) tiene solución analítica. Esto es una buena aproximación en caso tradicional de las OM en metales 3D, pero no es buena a las bajas temperaturas requeridas para observar los detalles finos de las OM en los materiales 2D.

De la expresión general de los factores de reducción, ec. (5.23) y (5.22), ya podemos ver que la dependencia con los niveles de energía es solo a través del término $(\partial \psi_\gamma / \partial \mu)$. Esto resulta útil para poder predecir el comportamiento del sistema solo en función de cuál es la dependencia de la fase ψ_γ con el potencial químico μ . Por ejemplo, para niveles de Landau 2D clásicos se tiene $\psi_\gamma \sim \mu$, mientras que para niveles de Landau relativistas (como en grafeno y los materiales 2D con *buckling*) se tiene $\psi_\gamma \sim \mu^2$. En consecuencia, en un gas de electrones clásico 2D, los factores de reducción no dependen del potencial químico, mientras que en los materiales 2D son proporcionales a μ ^[83,86]. Este comportamiento puede entenderse intuitivamente. En el caso clásico, los NL son equidistantes y por lo tanto el decaimiento (que depende del ensanchamiento y la excitación de los NL) es independiente de cuál es el último nivel ocupado. En cambio, en el caso relativista los NL no son equidistante, de forma tal que el decaimiento sí depende de cuál es el último nivel ocupado, lo cual naturalmente es función de μ . De todos modos, debe notarse que este comportamiento es válido solo si el ensanchamiento debido a las impurezas es independiente de los niveles de Landau.

5.1.4. Comparación entre ambas descripciones

A continuación compararemos y discutiremos los dos métodos para describir los efectos de decaimiento en las OM, desarrollados en las secciones anteriores, considerando, para simplificar, distribuciones de impurezas con un parámetro de ensanchamiento Γ constante. Como ejemplo general asumiremos NL 2D relativistas, los cuales ocurren en los materiales 2D. Para simplificar, ignoraremos cualquier efecto de desdoblamiento de espín o mezclado de valle. Los niveles de energía son $\varepsilon_n = a\sqrt{Bn}$, donde a es un parámetro dependiente del material. Para un dado potencial químico μ , la fase de las OM en el estado fundamental es $\psi = B^{-1}(\mu/a)^2$ [ver sección 4.2.2, ec. (4.50)]. Consideraremos B y μ tal que $\psi \gg 1$ (alta ocupación) y entonces podemos tomar solo la contribución SO a las OM, dada por la ec. (4.27).

Analizaremos los casos simples de (a) temperatura finita sin impurezas, (b) temperatura nula con un ensanchamiento Gaussiano, y (c) temperatura nula con ensanchamiento semi-

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

elíptico. En cada casoⁱ, el factor de ocupación \mathcal{F}_n y los factores de reducción R son obtenidos en el apéndice E; las OM están dadas por las ec. (5.12) y (5.20). En los factores de ocupación \mathcal{F}_n tomaremos la aproximación a primer orden

$$\varepsilon_n \simeq \mu + \left. \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial n} \right|_{n=\psi} (n - \psi) = \mu + \frac{\mu}{2\psi} (n - \psi). \quad (5.26)$$

Esta aproximación es válida en la condición de bajo decaimiento que asumimos ($\beta\mu \gg 1$ y $\mu/\Gamma \gg 1$), donde \mathcal{F}_n solo varía para ε_n cerca de μ . Notar que es el mismo tipo de aproximación que se tomó en las amplitudes, ec. (5.11). De esta manera, teniendo en cuenta que si $\psi = B^{-1}(\mu/a)^2$ entonces $\partial\psi/\partial\mu = 2\psi/\mu$, los factores de ocupación para los casos considerados resultan

$$(a) \quad \mathcal{F}_n = \left\{ 1 + \exp \left[\frac{\mu(n - \psi)}{2\psi k_B T} \right] \right\}^{-1} \quad (5.27)$$

$$(b) \quad \mathcal{F}_n = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{\mu(n - \psi)}{2\psi\Gamma} \right] + 1 \right\} \quad (5.28)$$

$$(c) \quad \mathcal{F}_n = \frac{1}{\pi} \left[\arctan \left(\frac{\mu(n - \psi)/2\psi}{\operatorname{Re} \left\{ \sqrt{\Gamma^2 - [\mu(n - \psi)/2\psi]^2} \right\}} \right) + \frac{\pi}{2} \right] \\ + \frac{\mu(n - \psi)}{2\pi\psi\Gamma^2} \operatorname{Re} \left\{ \sqrt{\Gamma^2 - [\mu(n - \psi)/2\psi]^2} \right\}, \quad (5.29)$$

y los factores de reducción

$$(a) \quad R(p) = \left(\frac{4\pi^2 p \psi k_B T}{\mu} \right) \operatorname{csch} \left(\frac{4\pi^2 p \psi k_B T}{\mu} \right) \quad (5.30)$$

$$(b) \quad R(p) = \exp \left[- \left(\frac{2\pi p \psi \Gamma}{\mu} \right)^2 \right] \quad (5.31)$$

$$(c) \quad R(p) = \frac{\mu}{2\pi p \psi \Gamma} J_1 \left(\frac{4\pi p \psi \Gamma}{\mu} \right), \quad (5.32)$$

donde J_1 es la función de Bessel de primer orden. Notar que las expresiones de \mathcal{F}_n y R están escritas como función de ψ . Luego, las OM dadas por las ec. (5.13) y (5.20) resultan

$$M_{osc}/A = \frac{1}{\pi} \arctan \left[\cot \left(\pi\psi - \pi \sum_n \mathcal{F}_n \right) \right] \quad (5.33)$$

ⁱDebe notarse que estamos considerando casos en los cuales la ec. (5.20) no puede ser resuelta en general. Así, no consideramos el caso, por ejemplo, de una distribución de impurezas con un ensanchamiento de tipo Lorentz, a temperatura nula, donde ya vimos que existe una solución analítica para las OM [ec. (5.24)].

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

$$M_{osc}/A = \sum_{p=1}^{\infty} R(p) \frac{\text{sen}(2\pi p\psi)}{\pi p}. \quad (5.34)$$

En general, cada expresión puede ser aproximada. Consideraremos campos magnéticos B tal que $n_0 - 1 < \psi < n_0$ y entonces $\text{floor}[\psi] = n_0 - 1$, donde $n_0 \gg 1$. Luego para la ec. (5.33), la reescribimos como la ec. (5.14) y tomamos la aproximación a primer orden, mientras que para la ec. (5.34) tomamos la suma de los primeros p_M armónicos. Así, para cada caso resultan las aproximaciones

$$M_{osc}/A \simeq M_{osc}^0/A + \mathcal{F}_{n_0} \quad (5.35)$$

$$M_{osc}/A \simeq \sum_{p=1}^{p_M} R(p) \frac{\text{sen}(2\pi p\psi)}{\pi p}, \quad (5.36)$$

donde $M_{osc}^0/A = \arctan[\cot(\pi\psi)]/\pi$ son las OM en el estado fundamental.

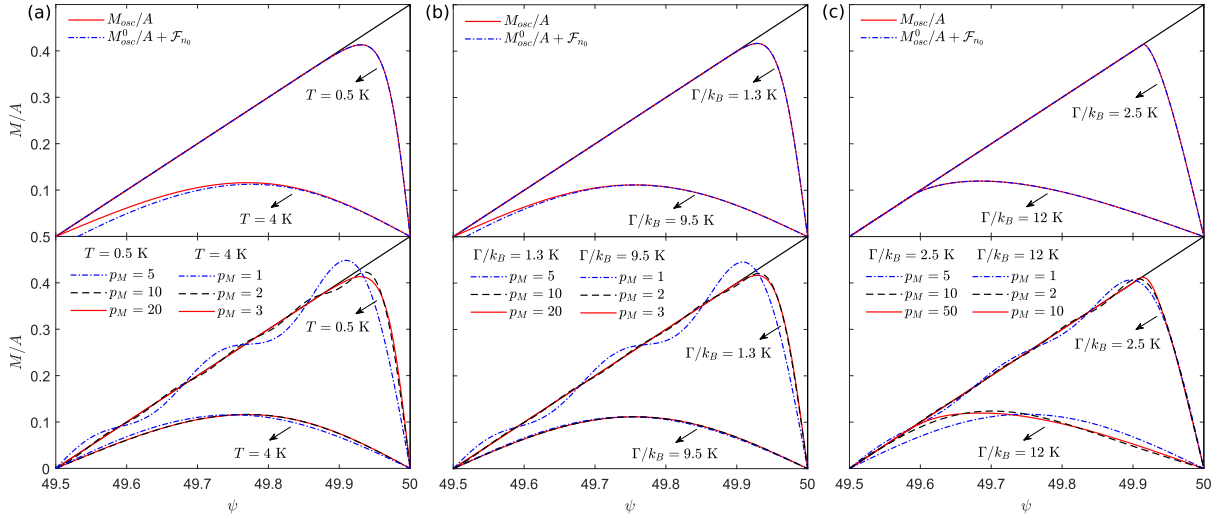


Figura 5.1: OM para un sistema con NL 2D relativistas $\varepsilon_n = a\sqrt{Bn}$, con $\mu = 0,25$ eV, como función de $\psi = (\mu/a)^2/B$, alrededor del pico en $\psi = n_0 = 50$. En las figuras de arriba graficamos las OM con los efectos de decaimiento en términos de la ocupación de los NL. En las figuras de abajo se pueden ver las OM con los efectos de decaimiento como factores de reducción. En ambas descripciones se muestran las aproximaciones dadas por las ec. (5.35) y (5.36). Consideramos los casos de: (a) temperatura finita sin impurezas, y temperatura nula con distribuciones de impurezas tipo (b) Gauss y (c) semi-elíptica. En todos los casos se grafica, en línea sólida negra, las SO del estado fundamental.

En la Fig. 5.1 se muestran las OM como función de ψ , con $\mu = 0,25$ eV. Para los tres casos, se muestran los efectos de decaimiento alrededor del pico $n_0 = 50$, considerando $n_0 - 1/2 < \psi < n_0$. En cada caso se graficó las SO M_{osc}^0/A (línea sólida negra) y las OM con decaimiento, usando la descripción de NL ocupados (figuras superiores) y la de factores de

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

reducción (figuras inferiores). La temperatura T y el parámetro de ensanchamiento Γ fueron especialmente elegidos para representar una reducción similar en la amplitud de las OM, considerando los dos casos de *alto* y *bajo* decaimiento. Como se observa, ambas formas de describir las OM con decaimiento dan el mismo resultado, como es de esperar. Sin embargo, difieren substancialmente en cuán efectivas son, particularmente si el decaimiento es alto o bajo.

A bajo decaimiento vemos que la descripción con factores de ocupación (figuras superiores) puede realizarse considerando solo la ocupación del NL $n = n_0$. Esto resulta muy conveniente a la hora de estudiar cómo el incremento de la temperatura, o la presencia de impurezas, afectan la observación de los detalles finos en las OM en el estado fundamental de los materiales 2D, como hemos visto en el capítulo anterior. En otras palabras, a bajo decaimiento el ensanchamiento de cada SO está enteramente dictado por cómo es el factor de ocupación de cada NL que causa el pico SO en el estado fundamental. En contraste, a bajo decaimiento la descripción con factores de reducción requiere más términos. Como se observa en las figuras inferiores, se necesitan varios armónicos en la suma de la ec. (5.36) para que la serie converja. Esto implica que no se puede realizar una descripción de las OM con solo el primer término de la serie (primer armónico), como usualmente se hace al utilizar la fórmula LK en los metales.

A mayor decaimiento se observa un comportamiento diferente. En las figuras superiores vemos que las OM no pueden ser descritas enteramente solo con la ocupación del NL $n = n_0$. Esto puede observarse en los casos (a) y (b), aunque debe notarse como las OM se pueden describir perfectamente con el siguiente término en la expansión (5.14). Es decir, para $T = 4$ K y $\Gamma/k_B = 9,5$ K (ensanchamiento tipo Gauss), se tiene

$$M_{osc}/A = M_{osc}^0/A + \mathcal{F}_{n_0} + (\mathcal{F}_{n_0-1} + \mathcal{F}_{n_0+1} - 1). \quad (5.37)$$

Así, la diferencia entre la aproximación a primer orden (línea punteada azul) y las OM totales (línea sólida roja) es causada por el cambio de ocupación en los NL $n_0 - 1$ y $n_0 + 1$. Para el caso (c) se observa que aún para un decaimiento relativamente alto, el efecto de decaimiento en las OM depende solo del factor de ocupación del NL n_0 . Esto es de esperar teniendo en cuenta la naturaleza del ensanchamiento semi-elíptico, en el cual si $\Gamma < \Delta\varepsilon_n$ entonces el ensanchamiento de cada NL es independiente (i.e. no hay *overlap* de la DOS). Por otro lado, en las figuras inferiores vemos que a alto decaimiento la descripción con los factores de reducción requiere menos armónicos. Esto puede resultar conveniente, especialmente cuando los factores de reducción se pueden aproximar de forma que la suma en la ec. (5.34) se puede resolver.

5.1.5. Efecto de la temperatura sobre cada oscilación

De acuerdo a lo visto en la sección anterior, a bajo decaimiento resulta conveniente describir la reducción de las OM a través de la descripción en función de la ocupación de los NL. En particular, cuando el decaimiento es suficientemente bajo tal que la aproximación (5.14) es válida alrededor de cada pico SO en $\psi = n_0 \in \mathbb{N}$, en el estado fundamental. Así, en decaimiento muy bajo, donde los detalles finos de las OM tales como el DE o el mezclado de valle (MV) son aún observables, las OM alrededor de cada pico $\psi = n_0$ pueden analizarse estudiando solo el factor de ocupación \mathcal{F}_{n_0} . Por ello, a fines de la discusión del efecto de la temperatura en las OM en los materiales 2D, resultará útil describir de manera genérica cómo es la reducción de cada oscilación al aumentar la temperatura. Consideraremos el sistema en el estado prístino, i.e. sin impurezas tal que $\rho(\varepsilon - \varepsilon_n) \rightarrow \delta(\varepsilon - \varepsilon_n)$ para cada nivel de energía. El análisis será realizado de manera genérica para un dado nivel de energía $\varepsilon_{n;\gamma}$, obviando el índice γ pero teniendo en cuenta que es válido para cualquier γ .

Dicho esto, consideraremos el efecto de la temperatura en un único pico de las OMⁱ correspondiente a un NL $n = n_0$, el cual ocurre para $\psi = n_0$, omitiendo los demás picos $\psi \neq n_0$. Luego, de acuerdo a la ec. (5.12), las OM son en generalⁱⁱ

$$M_{osc} = \begin{cases} M_{osc}^0 + A\mathcal{F}_0 & n_0 - 1 < \psi < n_0 \\ M_{osc}^0 + A(\mathcal{F}_0 - 1) & n_0 < \psi < n_0 + 1 \end{cases}, \quad (5.38)$$

donde, para el sistema prístino, el factor de ocupación \mathcal{F}_0 es la función de Fermi-Dirac alrededor de ε_0 [ver ec. (5.10)]. Considerando la aproximación (5.26), válida a bajo decaimiento, \mathcal{F}_0 está dado por la ec. (5.27) con $n = n_0$, i.e.

$$\mathcal{F}_0 = \frac{1}{1 + \exp[\beta\mu(n_0 - \psi)/2\psi]}. \quad (5.39)$$

De esta manera, la reducción de las OM a $T \neq 0$ es enteramente debido a \mathcal{F}_0 . Notar el cambio de signo en la exponencial, $\mathcal{F}_0 - 1 = -\{1 + \exp[-\beta\mu(n_0 - \psi)/2\psi]\}^{-1}$, lo cual es consistente con el límite $M_{osc} \rightarrow M_{osc}^0$ si $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$). (Específicamente, para $n_0 - 1 < \psi < n_0$ la posición última es $f = \text{floor}[\psi] = n_0 - 1$, mientras que para $n_0 < \psi < n_0 + 1$ la posición última es $f = \text{floor}[\psi] = n_0$.)

En la Fig. 5.2 se muestra esquemáticamente M_{osc}^0 y M_{osc} , como función de ψ , junto a las funciones exponenciales que dan el efecto de la temperatura. Como se observa, la forma en que las OM se ensanchan y reducen sigue el comportamiento de las funciones exponenciales.

ⁱCuando nos referimos a *pico* de las OM, debe tenerse en cuenta que estamos hablando de las oscilaciones discontinuas (SO) de las OM en el estado fundamental.

ⁱⁱDe aquí en adelante notaremos, para simplificar, $\mathcal{F}_{n_0} = \mathcal{F}_0$. Vale destacar también que estamos considerando un solo pico, de manera que $n_0 - 1 < \psi < n_0 + 1$.

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

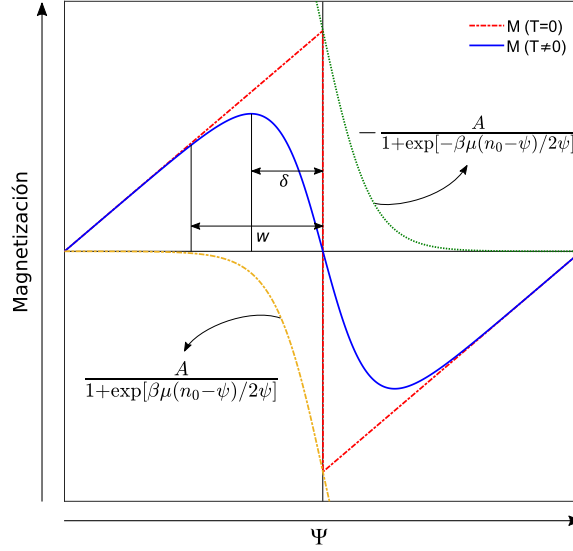


Figura 5.2: Representación esquemática del efecto de la temperatura sobre cada pico de OM, de acuerdo a la ec. (5.38). En línea punteada roja se muestra la SO a $T = 0$, y en línea azul sólida la magnetización a $T \neq 0$. También se muestran las exponenciales que reducen y ensanchan las OM a temperatura finita. El decaimiento de las OM se puede describir con los parámetros w y δ indicados. El ancho w mide el alcance del efecto de la temperatura sobre cada pico, mientras δ mide el desplazamiento de los extremos de las OM, respecto de su ubicación a $T = 0$.

Podemos identificar dos propiedades que nos dicen cómo es el decaimiento: el desplazamiento δ de los extremos de las OM, y el ancho w a partir del cual $M_{osc}^0 \simeq M_{osc}$ (siendo entonces el efecto de la temperatura despreciable). Tanto δ como w dependen de la temperatura, y en general también dependen de ψ y μ . Se obtienen a partir de las ecuaciones

$$\frac{\partial M_{osc}}{\partial \psi}(\psi = n_0 - \delta) = 0 \quad (5.40)$$

$$\mathcal{F}_0(\psi = n_0 - w) \ll 1. \quad (5.41)$$

La primera ecuación solo puede ser resuelta de manera numérica. De esta manera se obtiene un desplazamiento $\delta = \delta(T, n_0)$, y en general, para la misma temperatura, $\delta(T, n_0) \neq \delta(T, n_0 \pm 1)$, aunque usualmente $|\delta(T, n_0) - \delta(T, n_0 \pm 1)| \ll 1$. Sin embargo, más adelante se verá que al incrementar la temperatura debe considerarse el efecto de los picos cercanos al que ocurre en $\psi = n_0$, en cuyo caso el desplazamiento alcanza el límite $\delta \rightarrow 1/4$, igual al punto medio entre los máximos y los ceros de las OM en el estado fundamental. Esto es particularmente útil al analizar fenómenos como la dependencia del mezclado de los valles (mezclado de diferentes frecuencias) con la temperatura, en los materiales 2D con *buckling*, como también la envolvente de las OM, donde un desplazamiento constante de los extremos simplifica considerablemente las ecuaciones. Por otro lado, el ancho w se puede estimar de la

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

ec. (5.41) eligiendo un *cutoff* $\sigma \ll 1$ tal que $\mathcal{F}_0(n_0 - w) = \sigma$. Así, de la ec. (5.39) se obtiene un ancho

$$w = \frac{2n_0}{\beta\mu} \ln(1/\sigma - 1) \frac{1}{1 + 2 \ln(1/\sigma - 1) / \beta\mu} \simeq \frac{2n_0}{\beta\mu} \ln(1/\sigma - 1), \quad (5.42)$$

donde en la aproximación del último paso se consideró la condición de bajo decaimiento $\beta\mu \gg 1$. En general es suficiente tomar $\sigma \sim 10^{-2}$ tal que $\ln(1/\sigma - 1) \sim 5$. El ancho w es una medida del rango en el cual la temperatura afecta localmente cada pico de las OM, y como tal es fundamental a la hora estimar la observación de los detalles finos en las OM.

5.1.6. Efecto de las impurezas

Como ya hemos visto, el efecto de las impurezas es ensanchar la DOS de los niveles de energía. El tipo de ensanchamiento (cómo es la distribución de la DOS) depende en general del mecanismo de *scattering* de los electrones en un campo magnético. Esto tiene consecuencias en el decaimiento de las OM, puesto que su reducción puede depender significativamente de cómo es el ensanchamiento de los NL. Dicha dependencia no solo se refleja en el tipo de distribución de impurezas, sino en el mismo parámetro de ensanchamiento Γ , el cual es una medida del tiempo de *scattering* medio τ de los electrones. Para ver esto, en la Fig. 5.3 se muestran las OM para un sistema 2D con NL relativistas $\varepsilon_n = a\sqrt{Bn}$ con $\mu = 0,25$ eV, análogamente a lo considerado en la Fig. 5.1. Consideramos temperatura nula y distribuciones de ensanchamiento tipo Gauss (línea sólida roja), semi-elíptica (línea punteada azul) y Lorentz (línea punteada verde). Las OM se graficaron como función de la fase ψ , alrededor de pico en $\psi = n_0 = 50$.

Como se aprecia en la Fig. 5.3(a), para un dado parámetro de ensanchamiento Γ el decaimiento de las OM depende fuertemente de cómo es el tipo de distribución de impurezas. La distribución de Lorentz decae siempre más rápido, mientras que la distribución semi-elíptica decae siempre más lento. A bajo decaimiento, para las distribuciones de Gauss y semi-elíptica vemos que las OM no se reducen (son iguales a su valor en el estado fundamental) si la fase no está cerca de $n_0 = 50$. En otras palabras, lejos de $\psi = 50$, las OM se reducen a la magnetización en el estado fundamental (SO). El mismo comportamiento fue ya visto en la Fig. 5.1, donde a bajo decaimiento las OM eventualmente se reducen a las SO (línea sólida negra). La razón de esto es fácil de entender considerando la descripción del decaimiento en función de la ocupación de los NL: tanto las distribuciones de Gauss como la semi-elíptica decaen rápidamente y por lo tanto $\mathcal{F}_{n_0} \ll 1$ a no ser que ψ sea cercano a n_0 . Este no es caso para la distribución de Lorentz, para la cual su largo alcance implica que \mathcal{F}_{n_0} decae mucho más lentamente.

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

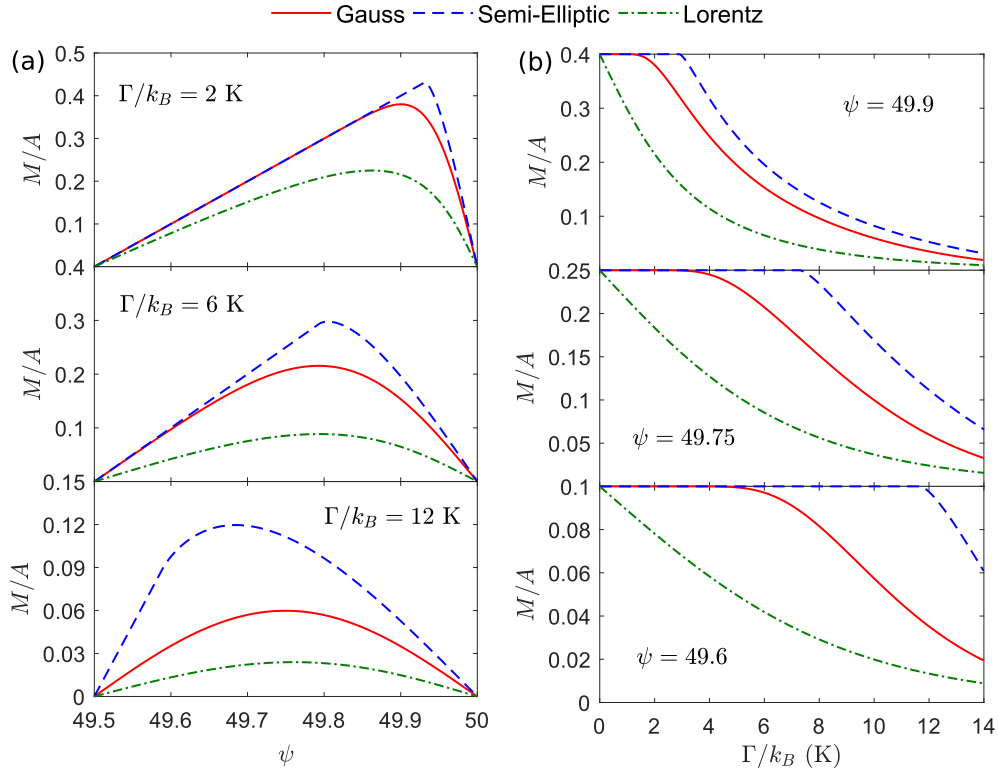


Figura 5.3: OM para un sistema con niveles de Landau 2D relativistas $\varepsilon_n = a\sqrt{Bn}$, con $\mu = 0,25$ eV, para diferentes distribuciones de impurezas a temperatura nula. En (a) graficamos las OM en términos de la fase $\psi = (\mu/a)^2/B$, alrededor del pico en $\psi = 50$, considerando diferentes Γ . En (b) graficamos las OM como función de Γ , a diferentes fases ψ .

La dependencia del decaimiento de las OM con el tipo de ensanchamiento también se puede observar en la Fig. 5.3(b). Vemos que el decaimiento de las OM depende de qué tan lejos está la fase ψ de n_0 , donde el nivel de energía ε_{n_0} cruza la energía de Fermi. En los tres casos considerados de ψ , el valor más alto de M/A en la figura corresponde al valor de la magnetización $M/A = \arctan[\cot(\pi\psi)]/\pi$ en el estado fundamental, la cual para $49,5 < \psi < 50$ implica $M/A = \psi - 49,5$. Así, para las distribuciones de Gauss y semi-elípticas vemos que mientras más alejado está ψ de n_0 (para $49,5 < \psi < 50$), más grande es el ensanchamiento Γ requerido para que las OM se empiecen a reducir. Por ejemplo, para $\psi = 49,75$ se observa que las OM se empiezan a reducir solo si $\Gamma/k_B > 3$ K para la distribución de Gauss y $\Gamma/k_B > 7$ para la distribución semi-elíptica. En contraste, para la distribución de Lorentz las OM prácticamente siempre están reducidas, independientemente del valor de ψ y Γ .

5.1.7. Oscilaciones del potencial químico

La formulación general desarrollada asume un potencial químico μ constante. La satisfacción de esta condición depende de la configuración del sistema, por ejemplo a través de la

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

aplicación de un *gate voltage*^[148,149]. Sin embargo, en la mayoría de los casos es la densidad electrónica $n_e = N/\mathcal{A}$ la que se mantiene constante. Como se vio en el capítulo anterior, esta distinción es importante en el estado fundamental, debido principalmente a la naturaleza discontinua de las OM. Es de esperar, entonces, que a bajo decaimiento las OM sigan difiriendo significativamente para los casos μ o N constante.

Con decaimiento, las OM para el caso N constante se obtienen de la formulación desarrollada, considerando las oscilaciones de μ con B (y otras variables, de haberlas) para que la densidad electrónica n_e se mantenga constante. Como se discutió en la introducción, en un típico metal 3D, a niveles de decaimiento usuales, las oscilaciones de μ son muy pequeñas y pueden ser despreciadas en la mayoría de los casos. En cambio, en los materiales 2D las oscilaciones de μ a bajo decaimiento pueden ser significativas. De hecho, como se vio en el capítulo anterior en el límite de no decaimiento, las oscilaciones de μ dan como resultado que las OM para N o μ constante difieran tanto en la frecuencia como en la amplitud de las oscilaciones.

Las oscilaciones de μ se obtienen de la misma manera que en un gas cuántico^[154], i.e. utilizando la relación $N = -(\partial\Omega/\partial\mu)_\mu$, donde Ω es el gran potencial (5.1). En función de los factores de ocupación (5.10), se obtiene

$$N = D \sum_{\gamma} \sum_n \mathcal{F}_{n;\gamma}. \quad (5.43)$$

De esta ecuación uno debería resolver $\mu = \mu(n_e, B, \beta, \Gamma)$, lo cual en general solo puede hacerse de manera numérica. Sin embargo, a bajo decaimiento (donde las oscilaciones de μ son relevantes) es posible hacer algunas simplificaciones. En efecto, ya sabemos que en el estado fundamental a N constante, el potencial químico μ se reduce al último nivel de energía ocupado ε_q (i.e. las oscilaciones de μ están dadas por las oscilaciones de ε_q ; ver sección 2.1.2). Por lo tanto, a bajo decaimiento es buena aproximación considerar la dependencia de $\mathcal{F}_{n;\gamma}$ con μ solo para los niveles de energía $\varepsilon_{n;\gamma}$ cercanos al último nivel ocupado ε_q , considerando para los demás $\mathcal{F}_{n;\gamma}$ su valor en el estado fundamental.

De esta manera, a fines prácticos conviene resolver la ec. (5.43) considerando los niveles $\varepsilon_{n;\gamma}$ ordenados como ε_r , tal que ε_q es el último nivel parcialmente ocupado en el estado fundamental. Teniendo en cuenta que medimos la densidad electrónica n_e respecto del punto de Dirac (neutralidad de carga), y los NL $n = 0$ tienen ocupación $2D/\lambda$ en la banda de conducción (ver sección 4.1.1), la ec. (5.43) queda

$$N = \frac{2D}{\lambda} + D \sum_r \mathcal{F}_r, \quad (5.44)$$

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

donde, como antes, λ es la degeneración extra debido al espín o valle, tal que $D = \lambda \mathcal{A} n_B$. A bajo decaimiento, considerando que solo los \mathcal{F}_r con r cercano a $r = q$ varían con la temperatura, podemos tomarⁱ un $c < q$ tal que $\mathcal{F}_r \simeq 1$ para $r < q - c$ y $\mathcal{F}_r \simeq 0$ para $r > q + c$. Luego, a bajo decaimiento se tiene

$$\frac{\nu}{\lambda} = \frac{2}{\lambda} + (q - c - 1) + \sum_{r=q-c}^{q+c} \mathcal{F}_r. \quad (5.45)$$

donde $\nu = n_e/n_B = N\lambda/D$ es el factor de llenado. Vale destacar que usualmente es suficiente considerar c pequeño (digamos $c < 6$, asumiendo ocupación relativamente alta). De esta manera, para una dada densidad electrónica n_e , resolviendo numéricamente la ecuación anterior se obtiene $\mu = \mu(n_e, B, \beta, \Gamma)$, el cual se reemplaza en la ec. (5.12) o (5.20) para obtener las OM con decaimiento a N constante. Los ejemplos prácticos de aplicación de este procedimiento se verán cuando analicemos las OM en grafeno y los demás materiales 2D.

5.2. Grafeno

En esta sección describiremos en detalle el efecto de la temperatura en grafeno, usando el formalismo general desarrollado en la sección anterior, para el caso de μ constante. Al final de la sección se considerará el caso de N constante, al considerar las oscilaciones del potencial químico de acuerdo a lo visto en la sección 5.1.7. Como se vio en el capítulo anterior, sección 4.2, las OM en grafeno en el estado fundamental presentan características únicas, no presentes en un 2DEG o un metal 3D típico. En particular, se detalló que las discontinuidades de las OM tienen una amplitud que dependen del DE de los niveles de Landau, así como también de la densidad electrónica y el campo magnético. En el caso de μ constante (sección 4.2.2), este comportamiento se vio reflejado en dos oscilaciones discontinuas para cada espín, con la misma frecuencia y una pequeña diferencia de fase debido al efecto Zeeman. Esta diferencia de fase produce dos discontinuidades en las OM en el estado fundamental, cuya observación depende del potencial químico (Fig. 4.5). Nos interesa entonces cómo afecta la temperatura este comportamiento. Específicamente, cómo la temperatura influye en la observación del DE en las OM, y cómo es el mecanismo de decaimiento; es decir, cómo se puede entender cuantitativamente la reducción de las OM tal que el DE se vuelve inobservable. También, la variación de la amplitud de las OM con la temperatura, en función de variables como el campo magnético y el potencial químico, y cómo es la envolvente de las OM.

ⁱEn el estado fundamental, el caso N constante corresponde a $\mu \rightarrow \varepsilon_q$, lo cual implica $\mathcal{F}_r = 1$ si $r \leq q$ y $\mathcal{F}_r = 0$ si $r > q$. Así, a bajo decaimiento μ seguirá oscilando alrededor de ε_q (aunque con menor amplitud a medida que aumenta la temperatura), con lo cual solo los \mathcal{F}_r cercanos $r = q$ varían respecto del estado fundamental.

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

En esta sección se analizan en detalle estas cuestiones utilizando la descripción del efecto de decaimiento en función de la ocupación de los NL (sección 5.1.2). Veremos que esta nueva descripción permite entender en detalle cómo el incremento de la temperatura reduce progresivamente las OM discontinuas en el estado fundamental. Para simplificar, el estudio teórico será realizado en grafeno prístino, i.e. sin impurezas. Sin embargo, a lo largo del desarrollo se discute cómo se espera que la presencia de impurezas afecte los resultados obtenidos.

5.2.1. Efecto de la temperatura

En grafeno, las OM en el estado fundamental, para el caso de μ constante, se obtuvieron en la sección 4.2.2. En particular, recordamos aquí que la fase de las OM es $\psi_s = \omega (B^{-1} + s\Delta)$, donde $\omega = (\mu/\alpha)^2$ es la frecuencia de las OM y $\Delta = 2\mu_B/\mu$ es la fase relativa para cada espín. Ahora bien, a temperatura finita y en el estado prístino (sin impurezas tal que la DOS de cada NL es $\rho_{n,s}(\varepsilon - \varepsilon_{n,s}) = \delta_{n,s}(\varepsilon - \varepsilon_{n,s})$, donde δ es la delta de Dirac), el factor de ocupación (5.10), para cada espín s , es la función de Fermi-Dirac

$$\mathcal{F}_{n,s} = \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon_{n,s} - \mu)}}, \quad (5.46)$$

donde $\varepsilon_{n,s} = \alpha\sqrt{Bn} - s\mu_B B$ son los NL en grafeno, considerando el DE. A bajo decaimiento tal que $\beta\mu \gg 1$, conviene expandir cada NL $\varepsilon_{n,s}$ alrededor del campo $B_{n,s}^{-1} = n/\omega - s\Delta$ en el cual ocurren las OM en el estado fundamental, i.e. donde $\varepsilon_{n,s}(B_{n,s}) = \mu$. Ya hemos utilizado este tipo de expansión en la ec. (5.26). De esta manera, siendo $\partial\varepsilon_{n,s}/\partial B = \varepsilon_{n,s}/2B - s\mu_B/2$, se tiene

$$\varepsilon_{n,s} - \mu \simeq \frac{\mu}{2B_{n,s}} (B - B_{n,s}), \quad (5.47)$$

donde se consideró $\mu_B B/\mu \ll 1$. La expansión anterior resultará útil al describir las OM periódicas como función de B^{-1} . Considerando esta expansión, la ec. (5.12) resulta

$$M_{osc} = M_{osc}^0 - \sum_{s=\pm 1} A_s \sum_{n \leq f_s} \frac{1}{1 + e^{-\beta\mu(B - B_{n,s})/2B_{n,s}}} + \sum_{s=\pm 1} A_s \sum_{n > f_s} \frac{1}{1 + e^{\beta\mu(B - B_{n,s})/2B_{n,s}}}, \quad (5.48)$$

donde M_{osc}^0 y A_s son las OM y amplitud en el estado fundamental, dadas por las ec. (4.59) y (4.56). El índice f_s es el último nivel ocupado en el estado fundamental, determinado por $f_s = \text{floor}[\psi_s]$. Para simplificar el análisis del efecto de la temperatura, en lo que sigue consideraremos el caso de alta ocupación ($\psi_s \gg 1$) tal que las OM en el estado fundamental se puede describir como una SO [ec. (4.60)]. Como ya vimos en la sección 4.2.2, Fig. 4.5, la condición de alta ocupación favorece la observación del DE, sobre el cual nos interesa estudiar la influencia de la temperatura. De esta manera, teniendo en cuenta la ec. (5.13),

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

las OM quedan

$$M_{osc} = \sum_{s=\pm 1} \frac{A_s}{\pi} \arctan \left\{ \cot \left[\pi \omega \left(\frac{1}{B} + s\Delta \right) + \sum_n \frac{\pi}{1 + e^{-\beta \mu (B - B_{n,s})/2B_{n,s}}} \right] \right\}. \quad (5.49)$$

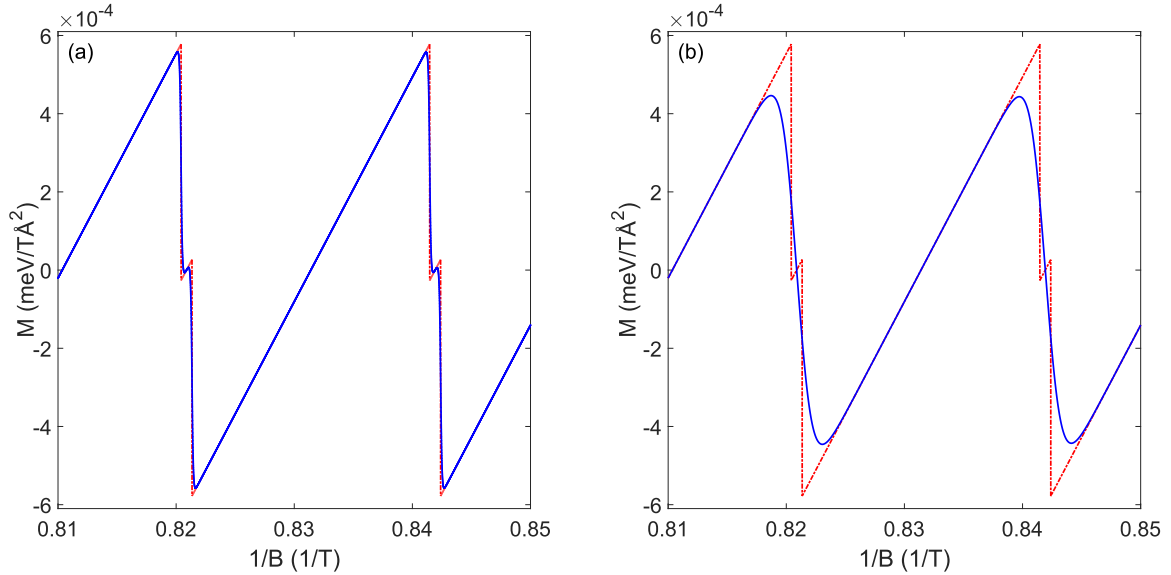


Figura 5.4: OM en grafeno, dadas por la ec. (5.49), para $\mu = 0,25$ eV. La línea punteada roja corresponde a las SO en el estado fundamental, mientras que la línea sólida azul corresponde a las OM para (a) $T = 0,1$ K y (b) $T = 1$ K.

En la Fig. 5.4 se muestran las OM dadas por la ec. (5.49) para temperaturas (a) $T = 0,1$ K y (b) $T = 1$ K, con $\mu = 0,25$ eV. Como se observa, el decaimiento de las OM al aumentar la temperatura afecta considerablemente la observación del DE. En la Fig. 5.4(a) vemos que a temperaturas muy bajas $T = 0,1$ K, se puede aún apreciar el efecto del DE en la magnetización, el cual se ve como una pequeña ondulación entre los dos picos de espín del estado fundamental. Sin embargo, al incrementarse la temperatura esta oscilación prácticamente desaparece de manera que no hay un efecto apreciable del espín en las OM. Como veremos en detalle más adelante, esta reducción del DE en las OM depende no solo del valor de la temperatura, sino también del campo magnético y la energía de Fermi. Así, mientras más grande es el campo magnético, mayor es la temperatura necesaria para que *desaparezca* el efecto del DE.

5.2.2. Observación del desdoblamiento de espín

Como se observa en la Fig. 5.4, el efecto del DE en las OM *desaparece* al aumentar la temperatura, habiendo entonces un límite a partir del cual el efecto es prácticamente

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

inobservable y el DE puede despreciarse en las OM¹. Una estimación para la temperatura a partir de la cual esto ocurre puede obtenerse utilizando la ec. (5.49). Definimos $x \equiv 1/B$ y consideramos dos picos en x_1 y x_2 , correspondientes al mismo NL $n = \ell$ con diferente espín, de forma que en general $x_1 = \ell/\omega - \Delta$ para el espín up, y $x_2 = \ell/\omega + \Delta$ para el espín down [ver ec. (4.51)]. A bajas temperaturas, entre los dos picos solo las ocupaciones de estos NL son apreciables, de manera que para $x_1 < x < x_2$ la ec. (5.48) resulta

$$M_{osc} = M_{osc}^0 - \frac{A_1}{1 + e^{\beta\mu(x-x_1)/2x}} + \frac{A_{-1}}{1 + e^{-\beta\mu(x-x_2)/2x}}, \quad (5.50)$$

donde hemos reescrito $(B - B_m)/2B_m = -(x - x_m)/2x$, $m = 1, 2$. De la ec. (5.50) tenemos que, en términos de la variable $x = 1/B$, el efecto de la temperatura se comporta siguiendo una distribución de Fermi-Dirac. Así, para ambas exponenciales podemos escribir $\beta\mu(x - x_m)/2x = \tilde{\beta}(x - x_m)$, donde $\tilde{\beta} = 1/k_B\tilde{T} \equiv \beta\mu/2x$ puede ser considerado el correspondiente parámetro de temperatura, el cual define cómo es el ensanchamiento de cada exponencial en la ec. (5.50). Esto nos muestra que el ensanchamiento depende no solo de la temperatura real T , sino también del potencial químico μ y el campo magnético $x = 1/B$. De esta manera podemos obtener una estimación de cómo la temperatura afecta la observación del DE en las OM, lo cual es dictado por cómo es el ancho w de cada exponencial (sección 5.1.5) en relación a la separación de los picos $x_2 - x_1 = 2\Delta$. Esto puede observarse en la Fig. 5.5, donde para diferentes temperaturas se muestran las OM (izquierda) y las exponenciales que aparecen en la ec. (5.50) (derecha).

Luego podemos identificar las cuatro situaciones mostradas. En el primer caso, Fig. 5.5(a), el ancho es $w < \Delta$, en cuyo caso se puede observar claramente el efecto del DE en la magnetización a $T \neq 0$. El segundo caso, Fig. 5.5(b), corresponde a cuando $w = \Delta$, de manera que las exponenciales se empiezan a solapar. Luego, para $w > \Delta$ (pero $w < 2\Delta$) en la Fig. 5.5(c), el efecto de DE empieza a desaparecer, aunque aún se puede notar una pequeña oscilación o cambio de curvatura en M_{osc} . Finalmente, cuando $w > 2\Delta$ como en la Fig. 5.5(d), el DE se vuelve prácticamente inobservable en M_{osc} , y las OM se ven como una única oscilación alrededor del centro $(x_1 + x_2)/2$.

Como vemos, la reducción del DE en las OM dependen del ancho w de las exponenciales. Este ancho ya fue descrito en la sección 5.1.5, ec. (5.42), donde fue medido como función de la fase ψ . Siendo en grafeno $\psi_s = \omega(x + s\Delta)$, para un dado pico de espín en $x_i = n_i/\omega - \Delta$,

¹Técnicamente, como se verá más adelante, el efecto del DE aún se mantiene en las OM, a través de un factor de reducción. De todos modos, aquí nos referimos a *desaparece* en el sentido de que las OM asociadas al DE ya no observan, como en la Fig. 5.4(b).

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

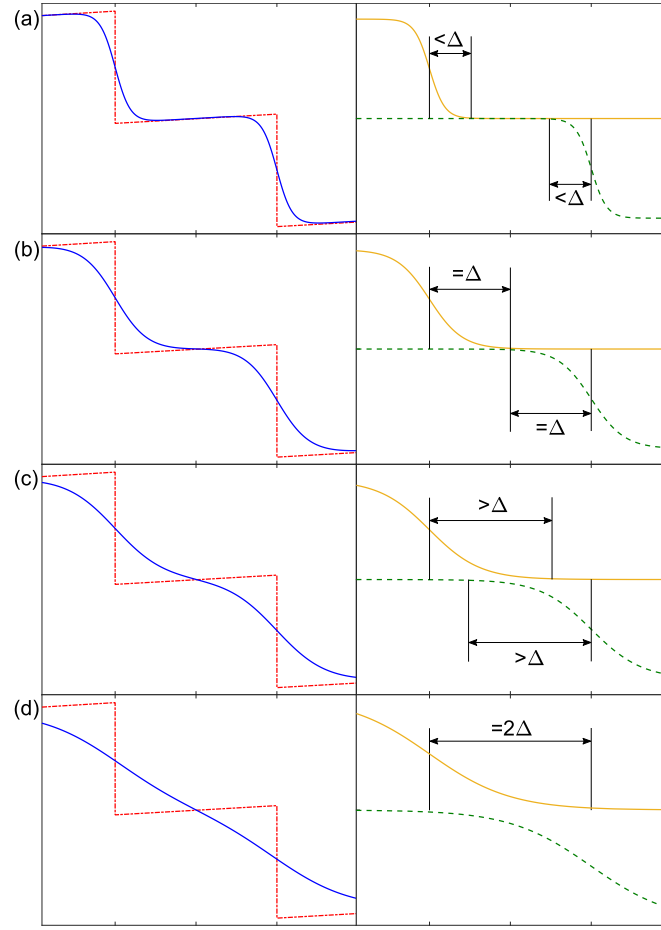


Figura 5.5: Influencia de la temperatura en el efecto del DE en las OM. En la izquierda se muestra la magnetización a cero temperatura (línea punteada roja) y a diferentes temperaturas (línea sólida azul). En la derecha se grafica la primera (línea sólida naranja) y la segunda (línea punteada verde) exponencial en la ec. (5.50). Los 4 casos mostrados corresponden a las exponenciales con un ancho w (a) $< \Delta$, (b) $= \Delta$, (c) $> \Delta$, (d) $= 2\Delta$, donde 2Δ la separación entre los picos de diferente espín.

el ancho de las OM como función de $x = B^{-1}$ resultaⁱ

$$w \simeq \frac{10xk_B T}{\mu}, \quad (5.51)$$

donde consideramos un *cutoff* $\sigma \sim 10^{-2}$ tal que $\ln(1/\sigma - 1) \sim 5$. Ahora bien, siguiendo la Fig. 5.5(d), la temperatura crítica a partir de la cual el DE se vuelve inobservable satisface $w \simeq 2\Delta$. Utilizando la expresión de w dada por la ec. (5.51), uno debería reemplazar en x el valor en el cual el ensanchamiento se está evaluando. Si tomamos el pico en x_1 o en x_2 , obtenemos dos temperaturas diferentes $T_{s,1} \simeq 2\mu_B/5k_B x_2$ y $T_{s,2} \simeq 2\mu_B/5k_B x_1$, pero

ⁱEste ancho, que se obtiene de la ec. (5.42) considerando la dependencia de la fase ψ con $x = B^{-1}$, también se puede obtener (quizás de manera más clara) con el mismo procedimiento que se utilizó en la sección 5.1.5, pero trabajando con las OM como función de x en vez de ψ . Es decir, determinar el ancho con la condición $\mathcal{F}_0(x = x_0 - w) \ll 1$. De todos modos, el resultado debe ser intuitivo considerando que $\psi \propto B^{-1}$.

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

$|T_{s,1} - T_{s,2}| = T_{s,1} (2\Delta/x_1) = T_{s,2} (2\Delta/x_2)$ con $\Delta/x_i \ll 1$ en ambos casos. Luego en general $T_{s,1} \simeq T_{s,2}$, y podemos tomar la temperatura promedio $T_s = (T_{s,1} + T_{s,2})/2$, lo cual implica

$$T_s \simeq \frac{2}{5} \frac{\mu_B B}{k_B}, \quad (5.52)$$

donde $B = \omega/\ell$ es el campo magnético en el centro de los picos de espín. La ec. (5.52) da una estimación de la máxima temperatura para cual se puede observar el DE en las OM. Notar que el resultado implica que el DE es observable si la energía térmica $k_B T$ no es mayor a $1/5$ de la energía de Zeeman $2\mu_B B$, lo que en términos generales podríamos decir $k_B T \ll 2\mu_B B$. Ahora bien, puesto que $B = \omega/\ell = \mu^2/\ell\alpha^2$, vemos que T_s es proporcional a μ^2 , por lo que valores altos de μ favorecen la observación del DE en las OM. (Este resultado puede parecer no intuitivo, puesto que del factor de reducción (1.12) uno esperaría que a altos valores de μ sea más difícil observar las OM a temperatura no nula.) De hecho, a fines prácticos la ec. (5.52) tiene que usarse asumiendo de partida valores relativamente altos de μ , que permitan de por sí observar el DE en las OM en el estado fundamental (ver Fig. 4.4), lo cual implica $\mu \gtrsim 0,1$ eV.

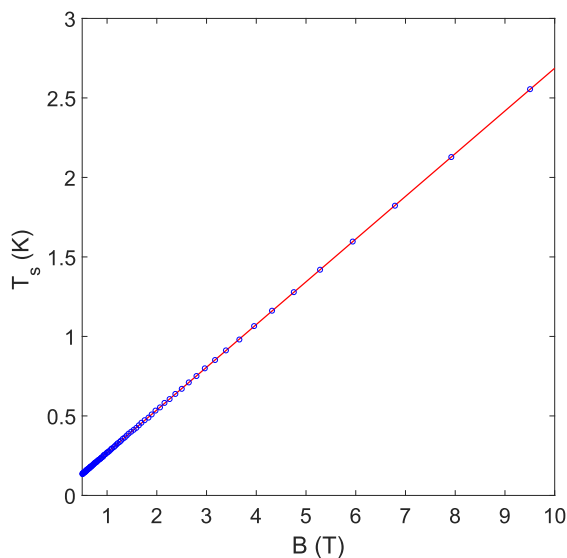


Figura 5.6: Temperatura de espín T_s , dada por la ec. (5.52), como función del campo magnético (línea sólida), y para $\mu = 250$ meV (puntos), donde $B = \omega/\ell = \mu^2/\ell\alpha^2$ es el campo magnético en el centro de los picos de espín correspondientes al NL $n = \ell$.

En la Fig. 5.6 se graficó la temperatura T_s como función del campo magnético B (línea sólida) y para $\mu = 0,25$ eV (puntos), donde $B = \omega/\ell = \mu^2/\ell\alpha^2$. Vemos que, en general, la temperatura T_s es muy pequeña a no ser que B sea muy alto. Por ejemplo, para $\mu = 0,25$ eV, tenemos $T_s = 0,3$ K para $B = 1$ T. Por lo tanto, incluso en campos relativamente

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

grandes, se requieren temperaturas muy bajas para observar el DE en las OM. A su vez, es de esperar que la temperatura de espín T_s disminuya si existen impurezas en el sistema. En efecto, en analogía a cómo decaen las OM debido a la temperatura, la observación del DE es factible solo si el ensanchamiento de los NL debido a las impurezas es menor que la energía de Zeeman.

5.2.3. Desplazamiento de los extremos

Como se indicó en la sección 5.1.5, al incrementarse la temperatura las OM se reducen y se ensanchan, de forma tal que los máximos y mínimos de las OM se desplazan respecto de su ubicación en el estado fundamental (donde las OM son discontinuas). Esto está determinado por el desplazamiento δ de los extremos de las OM, como se observa en la Fig. 5.2. El desplazamiento de los extremos depende, en general, tanto de la temperatura T como del campo magnético y el potencial químico μ . A continuación obtendremos dicha dependencia resolviendo la ec. (5.40) alrededor de una OM.

Para simplificar consideraremos temperaturas $T > T_s$, donde el DE en las OM es prácticamente inobservable y por tanto lo despreciamos. Así, las OM en el estado fundamental ocurren alrededor de los camposⁱ $x_\ell = B_\ell^{-1} = \ell/\omega$. Este es el comportamiento usual de las OM en grafeno, al ignorar el efecto Zeeman. Al ensancharse las OM, debido a la temperatura, los máximos y mínimos de las oscilaciones se desplazan desde x_ℓ a $x_\ell - p\delta$, donde $p = 1$ (-1) para los máximos (mínimos) y $\delta = \delta(T, B, \mu)$ es el desplazamiento, que en general depende de las tres variables T , B y μ . Como función de $x = B^{-1}$, el desplazamiento δ se obtiene de la condición $\partial M_{osc}/\partial x = 0$. Ahora bien, ignorando el DE y considerando alta ocupación, las OM están dadas por la ec. (5.49) con $\mu_B \rightarrow 0$, i.e.

$$M_{osc} = -\frac{2\mu}{\pi\phi} \arctan \left[\cot \left(\pi\omega x + \sum_n \frac{\pi}{1 + e^{\beta\mu(x-x_n)/2x}} \right) \right], \quad (5.53)$$

donde $x_n = n/\omega$. Luego la condición de extremo $\partial M_{osc}/\partial x = 0$ puede escribirse como

$$1 = \frac{\beta\mu}{8\omega x^2} \sum_n x_n \operatorname{sech}^2 \left[\frac{\beta\mu(x-x_n)}{4x} \right]. \quad (5.54)$$

Los $x = 1/B$ que satisfacen la ec. (5.54) dan todos los nuevos máximos y mínimos de las OM a $T \neq 0$. Notar que a temperatura cero ($\beta \rightarrow \infty$) la ec. (5.54) implica $x \rightarrow x_n$, como es de esperar. En general, en un pico en $x_\ell = \ell/\omega$, para obtener el correspondiente desplazamiento δ_ℓ es suficiente considerar solo los n cercanos a ℓ en la suma de la ec. (5.54). Los nuevos

ⁱEsto campos corresponden a los centros de los dos picos de espín, en x_1 y x_2 , con igual NL ℓ y diferente espín, de forma que $B_1^{-1} = \ell/\omega - \Delta$ y $B_2^{-1} = \ell/\omega + \Delta$. Así el centro está en $B^{-1} = (B_1^{-1} + B_2^{-1})/2 = \ell/\omega$.

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

extremos de las OM están localizados en $x = x_\ell - p\delta_\ell$. Conviene entonces reescribir la ec. (5.54) como función de x_ℓ y δ_ℓ , de manera que

$$1 = \frac{\beta\mu}{8\omega(x_\ell - p\delta_\ell)^2} \sum_n x_n \operatorname{sech}^2 \left[\frac{\beta\mu(x_\ell - p\delta_\ell - x_n)}{4(x_\ell - p\delta_\ell)} \right]. \quad (5.55)$$

En la Fig. 5.7 se muestra la solución gráfica de la ec. (5.55) para diferentes valores de T y NL ℓ , para $\mu = 0,25$ eV y $p = 1$ (desplazamiento de los máximos). Como se observa, el desplazamiento δ claramente depende del NL ℓ y por lo tanto del campo magnético. En particular, el desplazamiento δ se incrementa con la temperatura y decrece con el campo magnético. Esto implica que cuando la temperatura no es cero, las OM ya no son, técnicamente, periódicas en $1/B$, considerando el periodo en relación a cuándo suceden los máximos (o mínimos) de las OM. En efecto, como fue definido, el desplazamiento δ siempre es medido respecto de la posición de los picos a temperatura cero, donde la distancia entre un pico y otro es siempre la misma $1/\omega$ (periodo de las OM en el estado fundamental). En consecuencia, si a $T \neq 0$ el desplazamiento δ_ℓ no es el mismo para todos los NL ℓ , entonces el desplazamiento de los extremos no es constante y por lo tanto M_{osc} no es, estrictamente, una función periódica en $1/B$. De todas maneras, debe notarse este efecto es muy pequeño, puesto que para NL cercanos ℓ_1 y ℓ_2 usualmente se tiene $|\delta_1 - \delta_2| \ll 1/\omega$, de manera que el desplazamiento entre dos extremos contiguos es muy pequeño. Aún así, como veremos más adelante, la dependencia de δ con B sí juega un papel importante en cómo es la envolvente de las OM a bajas temperaturas.

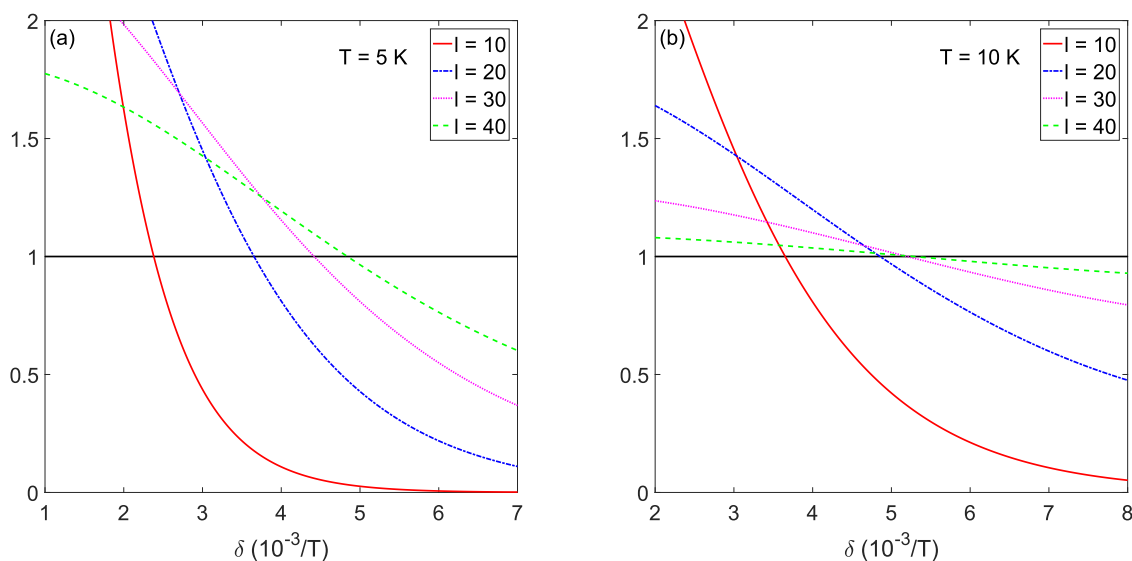


Figura 5.7: Solución gráfica de la ec. (5.55) para diferentes NL ℓ y temperaturas (a) $T = 5$ K, (b) $T = 10$ K. Todos los casos corresponden a $\mu = 0,25$ eV y al máximo desplazamiento ($p = 1$).

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

A pesar de que a bajas temperaturas el desplazamiento δ depende del campo B , notar en la Fig. 5.7 que al incrementarse la temperatura, el desplazamiento δ parece tender a un mismo valor, independientemente del NL ℓ . Así puede verse en la Fig. 5.7(b), para los casos $\ell = 30$ y $\ell = 40$, donde el desplazamiento δ tiende a un valor estable de aproximadamente $\delta \simeq 5,3 \times 10^{-3} \text{ T}^{-1}$. Esto significa que los máximos y mínimos de las OM tienden a estar localizados entre los picos y los ceros de las OM en el estado fundamental. En efecto, los ceros de las OM ocurren para campos $B_{0,n}^{-1} = (2n + 1) / 2\omega$ (i.e. entre dos discontinuidades de las SO en el estado fundamental). Luego la distancia entre los ceros y los picos es $(B_n^{-1} - B_{0,n}^{-1}) = 1/2\omega$, lo cual da $\sim 1,05 \times 10^{-2} \text{ T}^{-1}$ para $\mu = 0,25 \text{ eV}$, de forma que el punto medio se encuentra en $\sim 5,3 \times 10^{-3} \text{ T}^{-1}$. Este límite para el desplazamiento δ se verá en más detalle en los materiales 2D con *buckling*, donde dicho límite define la condición para observar las propiedades del valle en el batido de las OM.

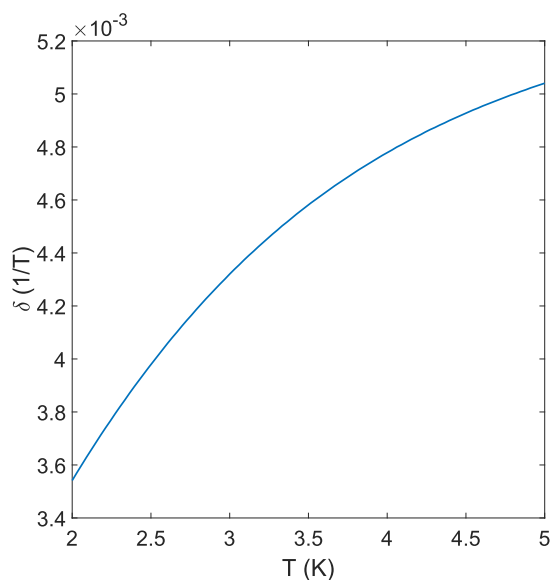


Figura 5.8: Solución numérica de la ec. (5.55) para δ_ℓ como función de la temperatura, donde $\mu = 0,25 \text{ eV}$ y $B = 1/x_\ell = 1,01 \text{ T}$ (correspondiente al NL $\ell = 47$).

También podemos analizar el desplazamiento δ como función de la temperatura, a un campo magnético fijo para un dado NL. Esto se ve en la Fig. 5.8, la cual muestra la solución numérica de la ec. (5.55) para $\mu = 0,25 \text{ eV}$ y $B = 1/x_\ell = 1,01 \text{ T}$ (correspondiente al NL $\ell = 47$). Como es de esperar, vemos que a bajas temperaturas δ_ℓ tiende a cero, aumentando al incrementarse T . Este comportamiento podría ser útil para inferir cambios de temperatura a partir de cómo varían los máximos de las OM.

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

5.2.4. Envoltente

A bajas temperaturas, tales que el desplazamiento δ para cada NL aún no llegó a su límite, la envoltente de las OM depende de la variación de δ con B . Sin embargo, conociendo dicha dependencia, la envoltente de las OM puede calcularse fácilmente. Empezamos considerando $x = 1/B$ y $x_1 < x < x_2$, donde x_1 y x_2 son dos picos adyacentes de las OM en el estado fundamental, de forma que en general $x_1 = (\ell - 1)/\omega$ y $x_2 = \ell/\omega$. Seguiremos asumiendo $T > T_s$ de manera que despreciamos el DE ($\mu_B \rightarrow 0$). Luego la ec. (5.53) se puede escribir

$$M_{osc} = M_{osc}^0 + \frac{2\mu}{\phi} \left(\sum_{n < \ell} \frac{1}{1 + e^{\beta\mu(x-n/\omega)/2x}} - \sum_{n \geq \ell} \frac{1}{1 + e^{-\beta\mu(x-n/\omega)/2x}} \right), \quad (5.56)$$

donde M_{osc}^0 son las OM en el estado fundamental dadas por la ec. (4.60) (asumiendo ocupación alta), las cuales sin DE quedan $M_{osc}^0 = -2\mu \arctan [\cot(\pi\omega x)] / \pi\phi$. Para obtener la envoltente positiva, correspondiente a los máximos de las OM, debemos simplemente eliminar la parte oscilatoria en la ec. (5.56). Para M_{osc}^0 , esto puede hacerse reemplazando $x = \ell/\omega - \delta$, la posición en la cual los máximos ocurren, donde δ es el desplazamiento obtenido de la ec. (5.55). Así obtenemos

$$M_\delta = \frac{2\mu}{\pi\phi} \arctan [\cot(\pi\omega\delta)], \quad (5.57)$$

donde definimos $M_\delta \equiv M_{osc}^0(\ell/\omega - \delta)$. Notar que M_δ es independiente de ℓ . Por otro lado, para las exponenciales en la ec. (5.56), debemos reemplazar $x = \ell/\omega - \delta$ solamente en el numerador. Así, definiendo $m = \ell - n$, se tiene

$$\sum_{m=1}^{\ell} \left[\frac{1}{1 + e^{\beta\mu(m/\omega - \delta)/2x}} - \frac{1}{1 + e^{\beta\mu(m/\omega + \delta)/2x}} \right] - \frac{1}{1 + e^{\beta\mu\delta/2x}} - \sum_{m=\ell+1}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{\beta\mu(m/\omega + \delta)/2x}}. \quad (5.58)$$

A bajas temperaturas, tal que $\beta\mu \ll 1$, el último término puede despreciarse puesto que es muy pequeño si $x_1 < x < x_2$. De esta manera, reagrupando las exponenciales obtenemos la siguiente expresión para la envoltente positiva

$$E_+ = \frac{2\mu}{\pi\phi} \left\{ \arctan [\cot(\pi\omega\delta)] - \frac{\pi}{1 + e^{\beta\mu\delta/2x}} + \sum_{m \geq 1} \frac{\pi \sinh[\beta\mu\delta/2x]}{\cosh[\beta\mu\delta/2x] + \cosh[\beta\mu m/2x]} \right\}. \quad (5.59)$$

Aunque esta envoltente fue originalmente obtenida para $x_1 < x < x_2$, la expresión dada por la ec. (5.59) se puede generalizar directamente para todos los campos magnéticos, provisto que se conozca la dependencia general de δ con B . La envoltente negativa es simplemente $E_- = -E_+$. Aunque el último término en E_+ involucra una suma, en la práctica es suficiente

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

con considerar solo los primeros términos. De hecho, los términos $m > 1$ solo dan correcciones a E_+ a temperaturas altas o campos magnéticos débiles, donde las OM son pequeñas.

La envolvente dada por la ec. (5.59) depende del desplazamiento δ , el cual en general depende del campo magnético B , como se mostró en la sección anterior. La solución numérica de δ se obtiene de la ec. (5.55). Esto da δ_ℓ como función de ℓ , a partir lo cual la función $\delta(x)$ puede obtenerse reemplazando $x = \ell/\omega$ y *fiteando* los puntos. Este procedimiento es realizado en la Fig. 5.9, para $T = 5$ K y $\mu = 0,25$ eV, donde δ fue *fiteado* con una función tipo Boltzmann. Notar que la Fig. 5.9(a) está en acuerdo con la Fig. 5.7, donde δ se incrementa con ℓ y por tanto con $1/B = x = \ell/\omega$, tendiendo al límite $\sim 5,3 \times 10^{-3} \text{T}^{-1}$. Una vez obtenido el desplazamiento $\delta(x)$, la envolvente positiva E_+ como función de x está dada por la ec. (5.59). Esto puede verse en la Fig. 5.9(b), donde se muestran las OM y las envolventes. Consideramos solo los términos $m = 1, 2$ en la suma del último término en la ec. (5.59), lo cual muestra que efectivamente solo los primeros términos son necesarios.

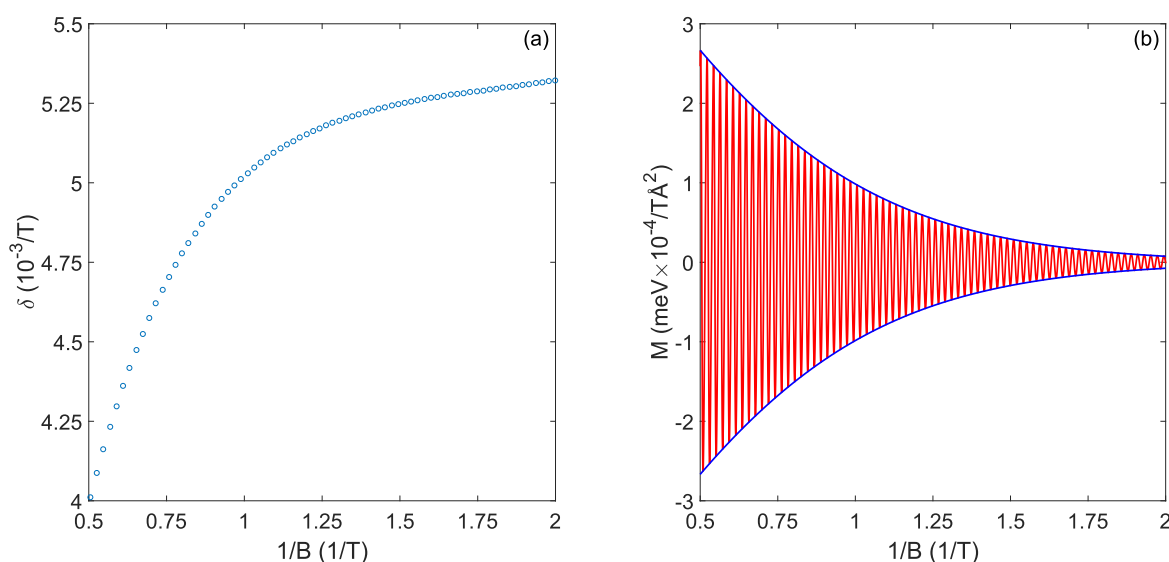


Figura 5.9: Para $T = 5$ K y $\mu = 0,25$ eV: (a) Solución numérica de la ec. (5.55), donde $\delta(x)$ se obtiene reemplazando $x = \ell/\omega$. Los puntos fueron *fiteados* con una función de Boltzmann. (b) OM con las envolvente positiva E_+ y negativa $E_- = -E_+$, donde E_+ está dado por la ec. (5.59). La función desplazamiento $\delta(x)$ utilizada es la obtenida del fiteo en (a).

5.2.5. Efecto de la temperatura para N constante

En las secciones previas se discutió en detalle el efecto de la temperatura en las OM en grafeno, considerando μ constante. Resta entonces estudiar cómo afecta la temperatura las OM para el caso N constante. Ya vimos, en el capítulo anterior, las OM en el estado fundamental para N constante, las cuales a su vez fueron comparadas con el caso μ constante

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

(sección 4.2.3). Esta comparación será útil, ya que de acuerdo a lo visto en las secciones previas, es de esperar que a bajo decaimiento las OM para N constante se vean como una reducción de cada discontinuidad en el estado fundamental.

Como se describió en la sección 5.1.7, las OM con decaimiento para el caso N constante se obtienen de las oscilaciones de μ con B , a partir de la ec. (5.45). En grafeno, considerando la degeneración de valle, se tiene $\lambda = 2$ y los niveles de energía ordenados ε_r están dados por la ec. (4.31). El último nivel ocupado en el estado fundamental es ε_q , donde $q = \text{floor}[\nu/2]$ [ec.(4.29)]. Considerando solo el efecto de la temperatura, i.e. grafeno prístino, el factor de ocupación \mathcal{F}_r es la distribución de Fermi-Dirac. Por lo tanto la ec. (5.45) queda

$$\frac{\nu}{2} = q - c + \sum_{r=q-c}^{q+c} \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon_r - \mu)}}. \quad (5.60)$$

Como primer ejemplo, consideramos el efecto de la temperatura al comparar las OM para μ o N constante como en la sección 4.2.3. Es decir, asumimos una densidad electrónica $n_e = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, y un potencial químico constante $\mu = \alpha\sqrt{n_e\phi}/2 \simeq 0,26 \text{ eV}$ (ver Fig. 4.6). Para el caso N constante, a distintas temperaturas las oscilaciones de μ se obtienen numéricamente de la ec. (5.60), y las OM reemplazando μ en la ec. (5.49). El resultado se observa en la Fig. 5.10, para tres temperaturas, considerando la misma región de campos magnéticos que en la Fig. 4.6. En las figuras superiores se muestran las OM para $\mu = \alpha\sqrt{n_e\phi}/2$ constante, y en las figuras inferiores las OM para N constante. En ambos casos, para cada temperatura se muestra un zoom del efecto de DE en las OM, donde en rojo se graficó además las OM en el estado fundamental, dadas por las ec. (4.60) (μ constante) y (4.45) (N constante).

Como se observa, las OM con temperatura para N constante se asemejan a las OM en el estado fundamental (ver Fig. 4.6). Esto es de esperar, teniendo en cuenta lo ya visto en las secciones previas para μ constante, i.e. a bajo decaimiento las OM mantienen el perfil de las OM en el estado fundamental, solo con una reducción de su amplitud. Las diferentes temperaturas elegidas en la Fig. 5.10 están relacionadas con la observación del DE en las OM, de acuerdo a lo visto en la sección 5.2.2. Para el caso en cuestión, el DE ocurre para $B^{-1} \simeq 0,522 \text{ 1/T}$ o $B \simeq 1,915 \text{ T}$. Por lo tanto, según la ec. (5.52), la temperatura de espín es $T_s \simeq 0,51 \text{ K}$, tal que el efecto del DE sería apreciable solo si $T < T_s$. Esto efectivamente se verifica en el caso μ constante (figuras superiores), pero también se aprecia que sigue valiendo en el caso N constante (figuras inferiores). Es decir, la condición $T < T_s$ sigue siendo una buena aproximación como condición necesaria para observar el DE en las OM a N constante.

Este resultado no debería sorprender puesto que la temperatura T_s está determinada por la relación entre la energía de Zeeman $2\mu_B B$ y la energía térmica $k_B T$, lo cual es independiente de la configuración del sistema (μ o N constante). Notar, sin embargo, que puesto que el efecto del DE se ve diferente en las OM para μ o N constante (como se observa en la Fig.

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

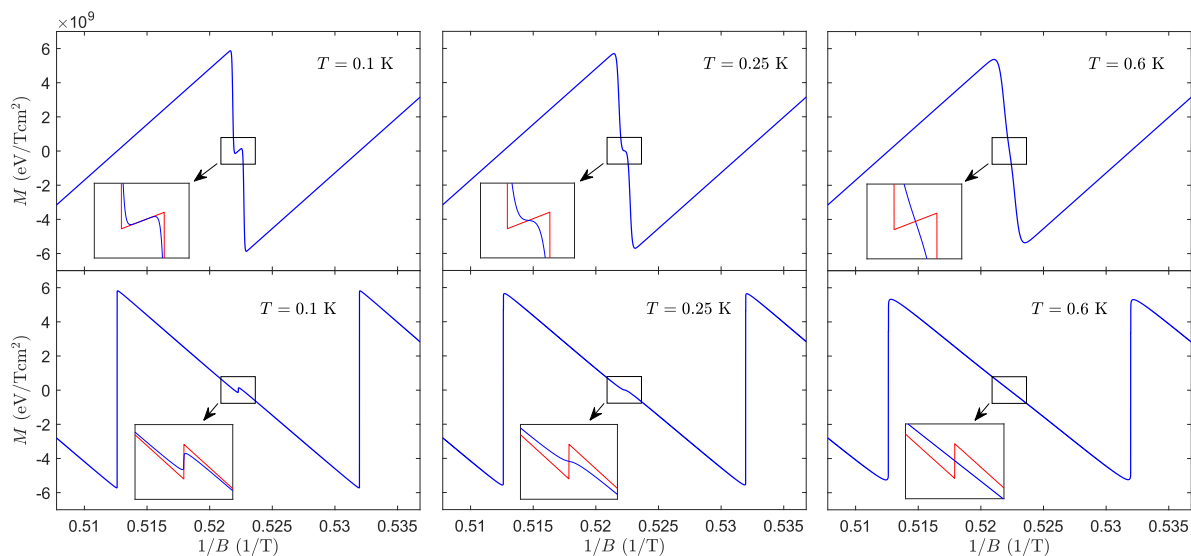


Figura 5.10: Comparación entre el efecto de la temperatura en las OM para μ constante (figuras superiores) y N constante (figuras inferiores), considerando $n_e = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $\mu = \alpha\sqrt{n_e\phi}/2 \simeq 0,26 \text{ eV}$. En ambos casos, y a distintas temperaturas, se muestra un zoom para el efecto del DE, donde en rojo se graficó las OM correspondientes al estado fundamental.

4.6; en más detalle explicado en la sección 4.2.3), el efecto de la temperatura sobre el DE es distinto, como se observa en los zooms de la Fig. 5.10. De todas maneras, sí se mantiene el comportamiento del decaimiento de las OM de acuerdo a la Fig. 5.5. Es decir, si $T < T_s/2$ (figuras 5.10 izquierda), se favorece considerablemente la observación del DE puesto que el ancho de las exponenciales en la ec. (5.49) es menor que la separación de los picos debido al DE. Para el caso N constante, teniendo en cuenta que la variable fundamental no es la fase sino la amplitud de las OM, esto se traduciría como que, cuando $T < T_s/2$, la reducción de la amplitud debido a la temperatura es menor que la discontinuidad de la magnetización cuando ocurre el pico S. Para valores de T cercanos o mayores a $T_s/2$, la reducción del DE es más pronunciada, como se observa en la figuras 5.10 del medio, aunque en dicho caso aún se observa el pequeño efecto del DE en un cambio de curvatura en las oscilaciones. Dicha curvatura desaparece progresivamente al aumentar la temperatura, hasta que para $T > T_s$ ya no se aprecia el efecto del DE. Bajo estas consideraciones, podría concluirse que el efecto del DE en el caso N constante es prácticamente observable como tal solo si $T < T_s/2$.

Al incrementarse la temperatura, las oscilaciones del potencial químico disminuyen, de forma que el caso μ constante debería reducirse al caso N constante, provisto que $\mu = \alpha\sqrt{n_e\phi}/2$. Este límite puede entenderse fácilmente considerando el desfasaje de las OM para los casos N o μ constantes en el estado fundamental (sección 4.2.3), y el efecto de la temperatura sobre cada pico de oscilación. Esto se muestra en la Fig. 5.11, para los mismo valores que en la Fig. 5.10, i.e. $n_e = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $\mu = \alpha\sqrt{n_e\phi}/2 \simeq 0,26 \text{ eV}$. En (a) se muestran las OM en función de $1/B$, a diferentes temperaturas, para μ constante

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

(figura superior) y N constante (figura inferior). A $T = 0$ se tienen las OM en el estado fundamental, como en la Fig. 4.6. El DE ocurre alrededor del mismo campo magnético, pero las discontinuidades asociadas al cambio de NL, de mayor amplitud, están desfasadas. Al aumentar la temperatura, las OM se reducen y los extremos se desplazan. En el caso μ constante, dicho desplazamiento ya se describió en detalle en las secciones anteriores, donde vimos que se alcanza un límite que está entre medio de las discontinuidades a $T = 0$ y los ceros de las OM. Para el caso N constante, se observa un comportamiento análogo al aumentar la temperatura, salvo que el desplazamiento es hacia el lado opuesto. Esto implica que al aumentar la temperatura, las OM para μ o N se reducen y desplazan hacia el mismo punto final (entre medio de los máximos y ceros), es decir, tienden a lo mismo.

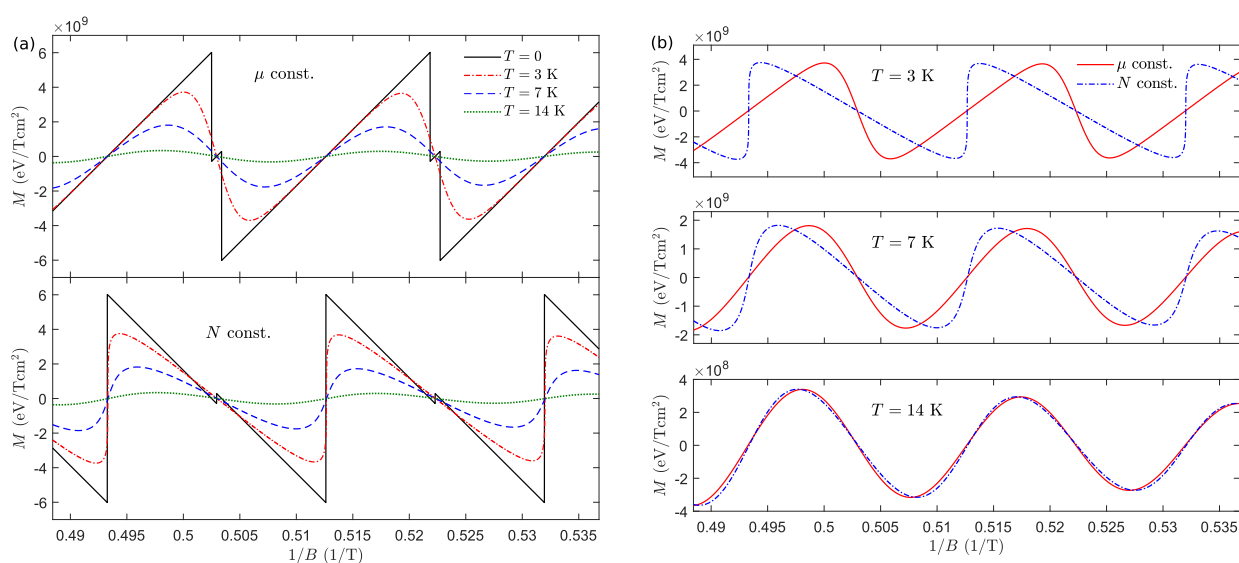


Figura 5.11: (a) Comparación entre las OM para μ y N constante, a diferentes temperaturas, para $n_e = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $\mu = \alpha\sqrt{n_e\phi}/2 \simeq 0,26 \text{ eV}$. (b) Para los mismos valores, OM a diferentes temperaturas para μ constante (línea sólida roja) y N constante (línea punteada azul).

Esta tendencia límite puede verse en más detalle en la Fig. 5.11(b), que muestra solo las OM a diferentes temperaturas. Vemos entonces que a $T = 3$ K las OM tienen la misma amplitud, pero sus máximos presentan aún un desfase, como en el estado fundamental (aunque menor). A $T = 7$ K las OM siguen reduciendo su amplitud, se ensanchan más, y sus extremos se acercan más hacia el mismo límite. Finalmente, a temperaturas suficientemente altas, como en el caso mostrado de $T = 14$ K, las OM para μ o N constante son prácticamente iguales. En dicho caso, y a temperaturas mayores, las oscilaciones de μ son despreciables y pueden ignorarse. En otras palabras, las OM a μ constante son prácticamente iguales a las oscilaciones a N constante. Esto es, en efecto, lo que sucede en la mayoría de los metales 3D, incluso a temperaturas mucho más bajas.

5.3. Materiales 2D con *buckling*

En esta sección estudiaremos el decaimiento de las OM en los materiales con *buckling*, en presencia de un campo eléctrico perpendicular E_z . Haremos especial énfasis en la influencia de la temperatura en la observación del mezclado de los valles y el fenómeno del batido. Como vimos en el capítulo anterior, este comportamiento es único a los materiales 2D con *buckling*, y aparece debido a la presencia de una diferencia de potencial entre las subredes (debido al campo E_z). Siguiendo el formalismo general desarrollado en la sección 5.1, y su aplicación en grafeno, consideraremos el caso de μ constante. Mientras que para grafeno nos enfocamos en el decaimiento de las OM a bajas temperaturas, donde la formulación en función de la ocupación de los NL (sección 5.1.2) resultó particularmente útil, en el caso de los materiales 2D veremos cómo uno puede utilizar las dos descripciones del decaimiento según conveniencia. Así, mientras que a bajas temperaturas utilizaremos la descripción del decaimiento en función de la ocupación de los NL (como en grafeno), a mayores temperaturas utilizaremos la descripción del decaimiento a través de factores de reducción (fórmula LK), puesto que será más conveniente. Esto permitirá ver cómo dependiendo de la situación una formulación puede ser más conveniente que la otra.

5.3.1. Efecto de la temperatura

Empezaremos considerando el efecto de la temperatura en función de la ocupación de los NL, según el formalismo desarrollado en la sección 5.1.2. En el estado fundamental, para μ constante las OM en los materiales 2D con *buckling* fueron obtenidas en la sección 4.3.2. Vimos que la fase de las OM, en función de los índices de valle y espín $\eta, s = \pm 1$, es $\psi_{\eta,s} = \omega_{\eta s} (B^{-1} + \Delta_{\eta s})$, donde $\omega_{\eta s}$ y $\Delta_{\eta s}$ son la frecuencia y fase relativa de las OM. Esto llevó a descomponer las OM en 4 tipos de picos, con dos frecuencias únicas ω_i y dos fases relativas Δ_i , dadas por las ec. (4.105) y (4.106). Siguiendo esta descomposición, los niveles de energía asociados a cada frecuencia de oscilación ω_i son $\varepsilon_i = [\mu^2 + \alpha^2 (nB - \omega_i)]^{1/2} - s\mu_B B$, donde por simplicidad omitimos explícitamente la dependencia de ε_i con los índices n y s ⁱ. Esto, a su vez, implica que en el estado fundamental las OM ocurren en campos magnéticos $1/B_n = n/\omega_i - s\Delta_i$ (nuevamente omitimos subíndices en B_n^{-1} para simplificar la notación). De esta manera, en el estado prístino el factor de ocupación (5.10) es

$$\mathcal{F}_{n,i,s} = \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)}}. \quad (5.61)$$

ⁱLa dependencia de ε_i con n es la que produce las OM con frecuencia ω_i , mientras que la dependencia de ε_i con s causa la fase relativa Δ_i

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

Como hicimos en grafeno, en la condición de bajo decaimiento $\beta\mu \gg 1$ conviene expandir cada ε_i alrededor de B_n , teniendo en cuenta que

$$\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial B} = \frac{\varepsilon_i^2 - \mu^2 + \alpha^2 \omega_i}{2B(\varepsilon_i + s\mu_B B)} \simeq \frac{\alpha^2 \omega_i}{2B\mu}, \quad (5.62)$$

considerando $\mu_B B/\mu \ll 1$. Por lo tanto, puesto que $\Delta_i = 2\mu\mu_B/\alpha^2\omega_i$ [ec. (4.106)], se tiene la expansión

$$\varepsilon_i - \mu \simeq \frac{\mu_B}{\Delta_i B_n} (B - B_n). \quad (5.63)$$

Notar que si $\lambda_{SO} \rightarrow 0$ y $l = 0$ (sin *buckling*), entonces $\omega_i = (\mu/\alpha)^2$ y $\Delta_i = 2\mu_B/\mu$, y la ec. (5.63) se reduce a la ec. (5.47) en grafeno, como es de esperar. De la ec. (5.12), las OM en los materiales 2D con *buckling* resultan

$$M_{osc} = M_{osc}^0 - \sum_{i=1,2} A_i \sum_{s=\pm 1} \left[\sum_{n \leq f_i} \frac{1}{1 + e^{\beta\mu_B(B_n - B)/B_n \Delta_i}} - \sum_{n > f_i} \frac{1}{1 + e^{-\beta\mu_B(B_n - B)/B_n \Delta_i}} \right], \quad (5.64)$$

donde M_{osc}^0 son las OM en el estado fundamental. El parámetro f_i , que indica la última posición ocupada en el estado fundamental, se obtiene a través de $f_i = \text{floor}[\psi_i]$, donde $\psi_i = \omega_i (B^{-1} + s\Delta_i)$. Considerando alta ocupación, tal que $\psi_i \gg 1$, las OM se reducen a la ec. (5.13), i.e.

$$M_{osc} = \sum_{i=1,2} \sum_{s=\pm 1} \frac{A_i}{\pi} \arctan \left\{ \cot \left[\pi \omega_i \left(\frac{1}{B} + s\Delta_i \right) + \sum_n \frac{\pi}{1 + e^{\beta\mu_B(B_n - B)/B_n \Delta_i}} \right] \right\}. \quad (5.65)$$

En la Fig. 5.12 se muestran las OM para diferentes temperaturas, en el caso de siliceno con $\mu = 0,25$ eV y $elE_z = 92$ meV. Esto da $\omega_1 > 0$ y $\omega_2 > 0$, con $\Delta\omega = \omega_1 - \omega_2 \simeq 3,6$ T, de manera que estamos graficando la región entre el máximo en $x_M = 4/\Delta\omega$ y el mínimo en $x_m = 4,5/\Delta\omega$ (ver sección 4.3.2.2). Las temperaturas consideradas, para este caso particular, fueron específicamente elegidas para representar cómo afectan la observación del DE y el mezclado de valle (MV) en las OM. Así, empezando desde el caso $T = 0$ en la Fig. 5.12(a), claramente observamos la *estructura fina* de las OM, debida al DE y el MV. Al incrementar la temperatura, todos los picos empiezan a ensancharse, y dependiendo del valor de T , algunos picos se reducen totalmente y dejan de observarse. Primero, en la Fig. 5.12(b) vemos que para $T = 0,1$ K, los picos se ensanchan pero que sin embargo aún se puede apreciar el DE en las OM, visto como una pequeña oscilación entre las oscilaciones más grandes. Si la temperatura sigue incrementándose, llegamos a la situación mostrada en la Fig. 5.12(c), donde para $T = 0,3$ K las OM están reducidas de forma tal que el DE ya no se observa. Notar, sin embargo, que aún se observa el efecto de MV en las OM, en la región de mínimo de batido ($1/B$ alrededor de $1,25$ 1/T). Si la temperatura se sigue incrementando, eventualmente

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

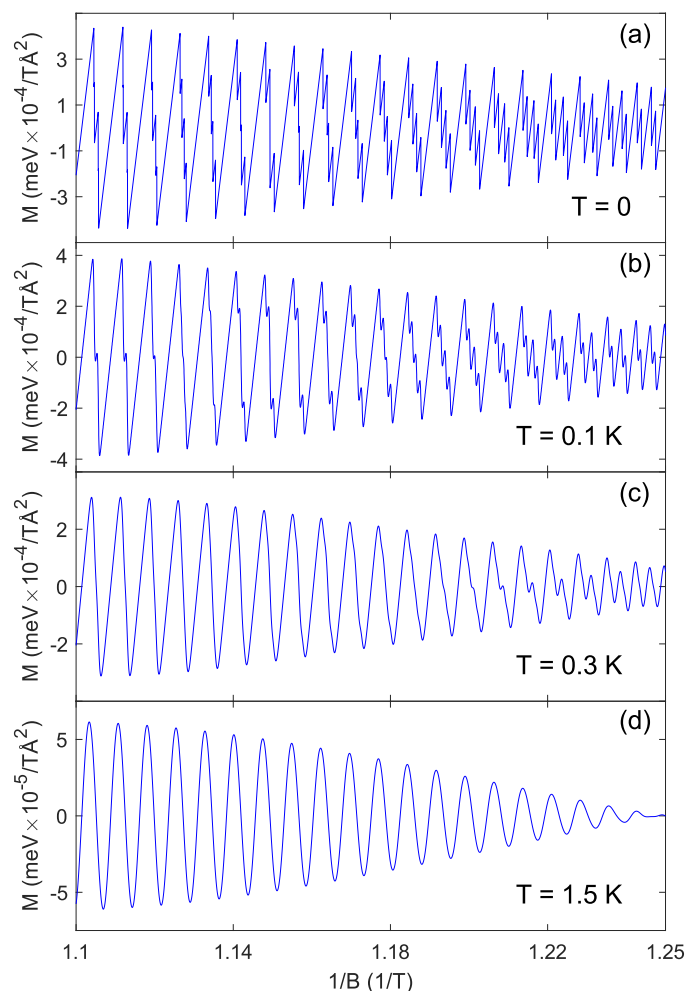


Figura 5.12: OM en siliceno, a diferentes temperaturas, para $\mu = 0,25$ eV y $eIE_z = 92$ meV, resultando en un fenómeno de batido con $(\omega_1 - \omega_2)/\omega_1 \sim 0,03$. Todos los casos corresponden a la región entre el máximo de batido en $1/B = 4/(\omega_1 - \omega_2)$ y el mínimo en $1/B = 4,5/(\omega_1 - \omega_2)$.

llegamos al estado mostrado en la Fig. 5.12(d), donde dicho mezclado alrededor del mínimo de las OM ya no se observa. Este comportamiento se mantiene a mayores temperaturas, donde las OM cada vez se reducen más pero preservan la misma forma, correspondiente a un fenómeno de batido puro.

En lo que sigue estudiaremos en detalle el origen de estas diferentes situaciones mostradas en la Fig. 5.12, haciendo énfasis en estimar la temperatura a partir de la cual ya no se observan los fenómenos de DE y MV en las OM. Para ello se utilizarán las propiedades de cómo afectan las exponenciales de los factores de ocupación $\mathcal{F}_{n,i,s}$ a las OM, como se mostró esquemáticamente en la sección 5.1.5, en particular la Fig. 5.2. Veremos que simplemente estudiando las propiedades del ancho w y desplazamiento δ de las OM, es posible entender cuantitativamente el comportamiento de las OM mostrado en la Fig. 5.12.

5.3.2. Observación del desdoblamiento de espín

Para estudiar la influencia de la temperatura en la observación del DE en las OM, seguimos el mismo procedimiento utilizado en el caso de grafeno (sección 5.2.2), aplicado ahora para cada una de las frecuencias presentes. Consideramos entonces dos picos de las OM con frecuencia ω , para un dado NL n , separados debido al DE, localizados en general en $1/B_1 = n/\omega - \Delta$ y $1/B_2 = n/\omega + \Delta$. De la ec. (5.65), la correspondiente OM esⁱ

$$M_{osc} = \frac{A}{\pi} \sum_{s=\pm 1} \arctan \left\{ \cot \left[\pi \omega \left(\frac{1}{B} + s\Delta \right) + \pi \mathcal{F}_{12} \right] \right\}, \quad (5.66)$$

donde $\mathcal{F}_{12} = \sum_{n=1,2} \{1 + \exp[\beta \mu_B (B_n - B) / \Delta B_n]\}^{-1}$. Siguiendo la Fig. 5.2, sabemos que el ancho w de las exponenciales en \mathcal{F}_{12} determina la observación de las OM a temperatura finita. Así, para dos picos separados por 2Δ debido al DE, uno esperaría observar el DE en las OM solo si $w < 2\Delta$. Esto ya se demostró gráficamente en la Fig. 5.5 para grafeno, lo cual sigue siendo válido en los materiales 2D con *buckling*, para ambas frecuencias ω_i de las OM. Resolviendo $\mathcal{F}(1/B - w) = \sigma$ se obtiene

$$w \simeq \frac{5k_B T \Delta}{\mu_B B}, \quad (5.67)$$

donde se consideró un *cutoff* $\sigma \sim 10^{-2}$, tal que $\ln(1/\sigma - 1) \sim 5$. Así, de la condición $w = 2\Delta$ obtenemos la temperatura de espín

$$T_s \simeq \frac{2\mu_B B}{5k_B}, \quad (5.68)$$

donde $B = \omega/n$ es el medio de los dos picos separados debido al DE. La condición para observar el DE a un dado B es que $T < T_s$. La expresión de T_s es exactamente la misma que la hallada en grafeno, lo cual es de esperar puesto que T_s depende solo del efecto del DE y no de la ruptura en la degeneración de valle que aparece en los materiales 2D. Más aún, T_s no depende de las propiedades particulares de los materiales 2D, tales como v_F , l o λ_{SO} , lo cual nuevamente es de esperar puesto que el DE afecta los niveles introduciendo un término de Zeeman $2\mu_B B$ que es independiente del material (más allá del factor- g que se asumió $g = 2$). En el caso particular considerado en la Fig. 5.12, para $1/B \sim 1,1$ 1/T tenemos $T_s \sim 0,25$ K, de manera que para la región de campos magnéticos considerados, uno no espera observar el DE en las OM para $T > 0,25$ K. Esto es consistente con las Fig. 5.12(b) y 5.12(c), donde para $T = 0,1$ K $< T_s$ se observa el DE, pero para $T = 0,3$ K $> T_s$ no se observa el DE.

ⁱPara simplificar obviamos el índice i , entendiéndose que el análisis es independiente y válido para ambas frecuencias ω_1 y ω_2 .

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

5.3.3. Observación del mezclado de valle

Llamamos mezclado de valle (MV) al patrón de mezclado que aparece alrededor del mínimo de batido en las OM, como se observa en las Fig. 5.12(a)-(c). Este efecto es independiente del DE y es causado por la ruptura de la degeneración de valle en los materiales 2D con *buckling*, lo cual conlleva a que haya un mezclado de picos de OM con diferentes frecuencias. La forma en la cual ocurre este mezclado (*overlap*) determina cómo es el patrón de mezcla observado. Para entender bien esto, consideramos el mínimo de batido en las OM, el cual ocurre cuando los picos con frecuencias ω_1 y ω_2 se encuentran en su máxima separación, en interferencia destructiva. Esto se muestra en la Fig. 5.13, donde en la izquierda graficamos los picos con frecuencia ω_1 (línea punteada) y ω_2 (línea sólida), y en la derecha graficamos la resultante OM obtenida a partir de su suma (por simplicidad omitimos el DE de cada pico, pero el resultado es independiente de ello). En la izquierda, las líneas verticales en rojo corresponden a la ubicación de los picos a $T = 0$ (saltos discontinuos en la magnetización), con su periodicidad $1/\omega$ indicada en cada caso.

La primera situación, Fig. 5.13(a), corresponde a los casos donde las OM presentan un efecto de MV alrededor del mínimo de las OM, como se observa en la figura de la derecha. Esto puede explicarse analizando cómo las OM son obtenidas a partir de la suma de las oscilaciones mostradas en la figura izquierda. Ahí vemos que, para dicha temperatura, el desplazamiento δ de los extremos es menor que $1/4\omega_1$ (línea punteada negra), de manera que los máximos y mínimos no están en la misma posición y por lo tanto las OM resultantes no son cero. Por otro lado, cuando la temperatura se incrementa, el desplazamiento δ alcanza el límite $1/4\omega$ para ambos picos, como se observa en la Fig. 5.13(b), en cuyo caso los máximos y mínimos se encuentran aproximadamente en la misma posiciónⁱ, causando una interferencia destructiva y un cero en la resultante OM. Este comportamiento se mantiene si la temperatura se sigue incrementando, puesto que el desplazamiento δ se mantiene en $1/4\omega$ y el incremento de temperatura solo reduce la amplitud de las oscilaciones. Por lo tanto, la condición para observar el MV en las OM es que el desplazamiento de los extremos δ sea menor que $1/4\omega$.

Para las OM con frecuencia ω_i y fase $s\Delta_i$, el desplazamiento δ del pico en $1/B_\ell = \ell/\omega_i - s\Delta_i$ se obtiene de la ecuación $\partial M_{osc}^{i,s}/\partial B(1/B_\ell - p\delta_{p,\ell}) = 0$, con $p = 1$ (-1) para el máximo (mínimo) desplazamiento. Luego, siguiendo lo obtenido en grafeno (ver sección 5.2.3), la ecuación para obtener δ resulta

$$1 = \frac{\beta\alpha^2}{8\mu(1/B_\ell - p\delta_{p,\ell})^2} \sum_n \frac{1}{B_n} \operatorname{sech}^2 \left[\frac{\beta\alpha^2\omega_i}{4\mu} \left(\frac{1}{B_\ell} - \frac{1}{B_n} - p\delta_{p,\ell} \right) \right]. \quad (5.69)$$

ⁱPuesto que en general las frecuencias ω_1 y ω_2 no son proporcionales, cuando $\delta_i = 1/4\omega_i$ los máximos y mínimos no ocurren exactamente en la misma posición (valor de B). Sin embargo, en la condición de batido $(\omega_1 - \omega_2)/\omega_1 \ll 1$, la diferencia en la posición de los máximos y mínimos es despreciable.

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

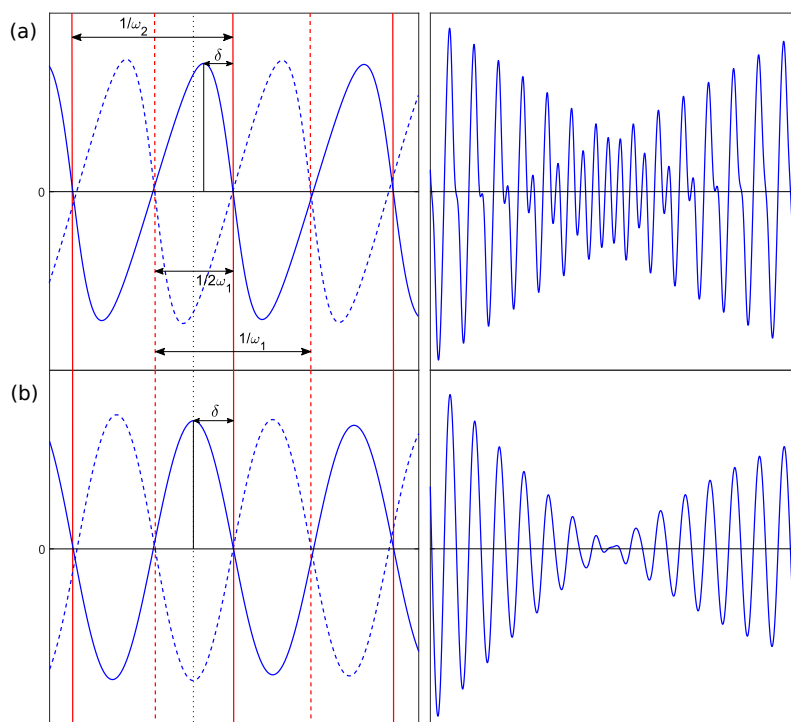


Figura 5.13: Relación entre el mezclado de valle (MV) en las OM alrededor del mínimo de batido, y el desplazamiento δ de los extremos de las OM. En la izquierda se muestran dos picos de OM M_1 (línea punteada) y M_2 (línea sólida), con frecuencias ω_1 y ω_2 , como función de $1/B$, donde las líneas rojas verticales corresponden a la ubicación de los picos (SO) a $T = 0$, mientras que las líneas azules son las OM a $T \neq 0$. La región del gráfico corresponde a la región del mínimo de las OM, donde hay interferencia destructiva entre los picos. En la derecha se muestran las OM resultantes alrededor del mínimo de batido. El caso en (a) corresponde a un desplazamiento $\delta < 1/4\omega$, y el caso (b) corresponde a un desplazamiento $\delta = 1/4\omega$.

Notar que la ec. (5.69) no depende de la fase Δ_i , y por lo tanto δ es independiente del espín. Más aún, para el mismo ℓ se tiene $\delta_+ \simeq \delta_-$ y entonces para cada pico es suficiente calcular el desplazamiento de los máximos (o mínimos). Como en grafeno, la ec. (5.69) se resuelve numéricamente para cada B_ℓ en función de la temperatura, obteniéndose que δ sigue una distribución exponencial (del tipo Boltzmann), con el límite $\delta \rightarrow 1/4\omega_i$.

La temperatura a la cual se alcanza este límite puede ser relacionada con el ancho w de la exponencial (factor de ocupación) asociada a cada pico que ocurre en B_ℓ , dado por la ec. (5.67). Esto fue realizado en la Fig. 5.14, donde se muestra la solución numérica de la ec. (5.69) para δ , y el ancho $w = 5k_B T \Delta_i / \mu_B B_0$. Los valores corresponden a siliceno, con $\mu = 0,25$ eV, $e l E_z = 92$ meV, y considerando el pico de espín up con frecuencia $\omega_1 = 137,53$ T para el NL $\ell = 172$, lo cual implica $1/B_\ell \simeq 1,25$ 1/T (por lo tanto el desplazamiento y el ancho calculados corresponden al pico alrededor del mínimo en la Fig. 5.12). Como podemos observar en la Fig. 5.14, no solo δ alcanza el límite $1/4\omega_1$, sino que cuando lo hace se tiene $w \gtrsim 1/\omega_1$. Así, tomando como referencia la Fig. 5.2, cuando en un dado

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

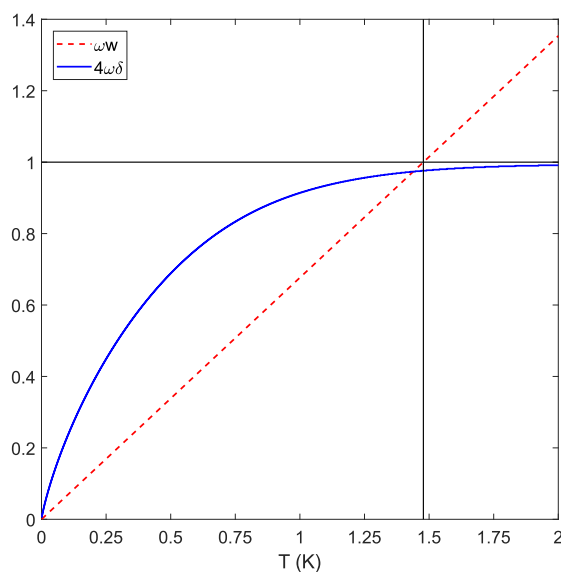


Figura 5.14: Relación entre el desplazamiento de los extremos δ y el ancho w de las OM, como se definieron en la Fig. 5.2, para siliceno con $\mu = 0,25$ eV y $elE_z = 92$ meV, considerando el pico de OM con frecuencia $\omega = \omega_1 \simeq 137,5T$ en $1/B_0 = 172/\omega_1 - \Delta_1 = 1,25$ 1/T. En línea punteada roja se graficamos ωw , donde $w = 5T\Delta/\mu_B B_0$ es el alcance de la temperatura para el pico en $1/B_0$. En línea sólida azul graficamos $4\omega\delta$, donde δ es el desplazamiento de los máximos obtenido numéricamente de la ec. (5.69), con $B_\ell = B_0$ y $p = 1$.

pico el desplazamiento δ aproximadamente alcanza su valor límite, entonces el ancho w es aproximadamente igual al periodo de oscilaciónⁱ $1/\omega$. Esto nos proporciona una simple estimación para la temperatura T_v para la cual $\delta \rightarrow 1/4\omega$, puesto que en tal caso $w \sim 1/\omega$ en la ec. (5.67) y entonces

$$T_v \simeq \frac{\hbar v_F^2 e B}{5\mu k_B}. \quad (5.70)$$

Luego, siguiendo la Fig. 5.14, T_v es también la temperatura para la cual el MV dejaría de ser observado en las OM. En tal caso debe notarse que el campo magnético que va en la ec. (5.70) corresponde a cuando ocurre la interferencia destructiva de los picos, en el mínimo absoluto en $1/B = (n + 1/2) / (\omega_1 - \omega_2)$, donde n es un entero (ver sección 4.3.2.2). Para el caso particular de la Fig. 5.12 se obtiene $T_v \simeq 1,48$ K. Esto está en acuerdo con la Fig. 5.12(d), donde para $T = 1,5$ K ya no se observa el MV en las OM.

Resulta interesante comparar la temperatura de valle T_v con la temperatura de espín T_s dada por la ec. (5.68). Tenemos $T_s/T_v = 2\mu_B\mu/\hbar v_F^2 e$, lo cual de las ec. (4.105) y (4.106) implica $T_s/T_v = 2\Delta\omega$. Así la relación entre estas dos temperaturas es igual a la relación entre

ⁱEsta correspondencia entre δ y w puede relacionarse con la influencia de los demás picos. Es decir, cuando el ancho w es igual o mayor que el periodo de las oscilaciones $1/\omega$, las exponenciales que dan el efecto de la temperatura empiezan a solaparse. Como esta influencia es en principio simétrica en ambos lados, no hay una variación del desplazamiento δ . El efecto es, entonces, solamente una reducción global de la amplitud de las OM, pero manteniendo el punto donde ocurren los máximos y mínimos.

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

el periodo $1/\omega$ y la diferencia de fase 2Δ (siendo esta relación igual para todos los picos, independientemente de su frecuencia o fase). Por supuesto, este resultado es de esperar puesto que cada temperatura fue calculada de la ec. (5.67), con $w = 2\Delta$ para T_s y $w = 1/\omega$ para T_v .

5.3.4. Aproximación de las OM para *altas temperaturas*

Cuando $T > T_v$, podemos decir que la *estructura fina* de las OM es reducida por la temperatura, quedándose uno entonces con oscilaciones cuyos extremos, para cada frecuencia, están siempre desplazados $1/4\omega$ respecto de la posición de los picos a $T = 0$. En esta situación resulta más conveniente describir las OM utilizando la descripción del decaimiento a través de factores de reducción, i.e. la fórmula LK (sección 5.1.3). Ahora bien, para los materiales 2D con *buckling*, la fase de las OM es $\psi_i = \omega_i (B^{-1} + s\Delta_i)$. Para $T > T_s$ se puede despreciar la dependencia de ψ_i con μ a través de la fase $s\Delta_i$. Luego la dependencia de ψ_i con μ es solo a través de ω_i [ec. (4.105)], por lo que $\partial\psi_i/\partial\mu = 2\mu/\alpha^2$, independientemente de los índices i y s . El factor de reducción de la temperatura (5.23) resulta

$$R_T(p) = \left(\frac{4\pi^2 p \mu k_B T}{\alpha^2 B} \right) \operatorname{csch} \left(\frac{4\pi^2 p \mu k_B T}{\alpha^2 B} \right). \quad (5.71)$$

Notar que este factor R_T es el mismo obtenido por Sharapov *et al.* en grafeno^[86] (aunque aquí $\alpha = v_F \sqrt{2e\hbar}$ depende del material 2D). La dependencia de R_T con el potencial químico μ parece implicar que a mayor ocupación mayor es el decaimiento. Sin embargo, hay que tener cuidado con esto, puesto que la ocupación (determinada por ψ_i) depende no solo de μ , sino también del campo B . En otras palabras, un valor relativamente alto de μ (como venimos considerando, puesto que favorece la observación del DE; ver Fig. 4.4) no necesariamente implica un mayor decaimiento de las OM, puesto que en la expresión de R_T un valor alto de μ se puede compensar con un valor alto de B .

Teniendo en cuenta estas consideraciones, bajo la condición de alta ocupación, donde las OM en el estado fundamental están dadas por las SO (4.103), la fórmula LK (5.20) (con $R_\Gamma = 1$ para el estado prístino) resulta

$$M_{osc} = \sum_{i=1,2} \sum_{s=\pm 1} A_i \sum_{p=1}^{\infty} \frac{R_T(p)}{\pi p} \operatorname{sen} \left[2\pi p \omega_i \left(\frac{1}{B} + s\Delta_i \right) \right]. \quad (5.72)$$

La ventaja de utilizar esta expresión, en vez de la ec. (5.65), es que a altas temperaturas tales que $T > T_v$, podemos aproximar R_T usando $\operatorname{csch}(\lambda p) \simeq 2 \exp(-\lambda p)$, donde $\lambda = 4\pi^2 \mu k_B T / \alpha^2 B$. En efecto, esta aproximación implica $\exp(-\lambda p) \ll 1$ o $\lambda p \gg 1$, lo cual se

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

satisface para todo p si

$$T \gg \frac{\hbar v_F^2 e B}{2\pi^2 \mu k_B} = 5T_v/2\pi^2 \simeq T_v/4. \quad (5.73)$$

Así, es buena aproximación considerar $\text{csch}(\lambda p) \simeq 2 \exp(-\lambda p)$ si $T > T_v$. Luego la sumatoria sobre p en la ec. (5.72) puede ser evaluada para obtener

$$M_{osc} \simeq \sum_{i=1,2} \sum_{s=\pm 1} A_i \lambda \text{sen} \left[2\pi\omega_i \left(\frac{1}{B} + s\Delta_i \right) \right] \frac{1}{\pi \cosh(\lambda)}, \quad (5.74)$$

donde, como $\cosh(\lambda) \gg 1$, consideramos $\cosh(\lambda) - \cos[2\pi\omega_i(1/B + s\Delta_i)] \simeq \cosh(\lambda)$. Podemos simplificar aún más la expresión de M_{osc} notando que para altas temperaturas, la diferencia entre las amplitudes A_i es prácticamente despreciable, de manera que podemos utilizar la amplitud $A_p/4$, donde

$$A_p = 2 \sum_{i=1,2} A_i \simeq \frac{2}{\phi\mu} [\lambda_{SO}^2 + (e l E_z)^2 - \mu^2]. \quad (5.75)$$

De esta manera, reescribiendo la sumatoria senoidal en la ec. (5.74), obtenemos el resultado

$$M_{osc} \simeq A_p \frac{k_B T \gamma}{B} \text{sech} \left(\frac{\pi k_B T \gamma}{B} \right) \cos(\gamma\mu_B) \text{sen} \left[\frac{\pi(\omega_1 + \omega_2)}{B} \right] \cos \left[\frac{\pi(\omega_1 - \omega_2)}{B} \right], \quad (5.76)$$

donde definimos $\gamma \equiv 2\pi\mu/\hbar v_F^2 e$. Es instructivo analizar cada término en la ec. (5.76). El efecto de la temperatura está enteramente contenido en el término $k_B T \gamma \text{sech}(\pi k_B T \gamma/B)$, el cual tiende a cero al incrementarse T , actuando simplemente como una reducción global de la amplitud de las OM. En otras palabras, en el régimen considerado la temperatura no modifica la forma de cada pico de las OM, lo cual es de esperar, puesto que estamos considerando temperaturas tales que el desplazamiento de los extremos ya alcanzó el límite $\delta \rightarrow 1/4\omega$ para todos los campos B considerados. El término $\cos(\gamma\mu_B)$ es independiente del campo magnético y contiene el efecto del DE, lo cual se ve como una pequeña reducción de la amplitud de las OMⁱ. Por último, las dos funciones trigonométricas en la ec. (5.76) dan el perfil de las OM. Bajo la condición de batido $(\omega_1 - \omega_2)/\omega_1 \ll 1$ (sección 4.3.2.2), el primer término causa las pequeñas oscilaciones internas, de bajo periodo, mientras que el segundo término actúa como la envolvente de las oscilaciones internas. Esta separación entre cada contribución será particularmente útil para obtener la envolvente de las OM.

ⁱA las *altas* temperaturas consideradas, este efecto del DE podría, de hecho, despreciarse considerando $\mu_B \rightarrow 0$ y $\cos(\gamma\mu_B) = 1$, como se hizo en grafeno al estudiar la envolvente de las OM (sección 5.2.4).

5.3.5. Envoltente

Obtendremos ahora una expresión para la envoltente de las OM, en la condición de batido tal que $(\omega_1 - \omega_2)/\omega_1 \ll 1$. En el caso general, a una dada temperatura uno debería obtener numéricamente el desplazamiento δ de los máximos y mínimos de las OM, como función de B , y de ahí construir la envoltente de las oscilaciones, como fue realizado en grafeno (sección 5.2.4). La generalización de este procedimiento a los materiales 2D con *buckling* es trivial, considerando que ahora hay dos frecuencias que producen un fenómeno de batido. De todas maneras, omitiremos esta región de transición en la que δ depende de B , y consideraremos el caso de *altas* temperaturas, tal que se alcanzó el límite $\delta = 1/4\omega$. Esto implica $T > T_v$ para todos los campos magnéticos considerados, en cuyo caso es conveniente trabajar con la ec. (5.76) para las OM. Para obtener entonces la envoltente, simplemente tenemos que eliminar las oscilaciones internas de la función senoidal, evaluándola en su máximo valor. Así obtenemos la envoltente

$$E \simeq A_p \frac{k_B T \gamma}{B} \operatorname{sech} \left(\frac{\pi k_B T \gamma}{B} \right) \cos(\gamma \mu_B) \cos \left[\frac{\pi(\omega_1 - \omega_2)}{B} \right]. \quad (5.77)$$

El hecho de que esta envoltente es obtenida cuando $\sin[\pi(\omega_1 + \omega_2)/B] = 1$ implica que el desplazamiento de los extremos, para las oscilaciones internas, es de la forma $1/B = 2\ell/(\omega_1 + \omega_2) - 1/2(\omega_1 + \omega_2)$, lo cual implica $1/B = \ell/\omega - \delta$ con $\omega = (\omega_1 + \omega_2)/2$ y $\delta = 1/4\omega$. Por lo tanto obtenemos el resultado previo de que en este régimen de *altas* temperaturas, el desplazamiento de los extremos es igual a $1/4\omega$, con la frecuencia siendo el promedio entre ω_1 y ω_2 . De la ec. (5.77) también podemos obtener la envoltente E_d del decaimiento de la temperatura, tomando el módulo de E y $\cos[\pi(\omega_1 - \omega_2)/B] = 1$. Es decir,

$$E_d = |A_p| \frac{k_B T \gamma}{B} \operatorname{sech} \left(\frac{\pi k_B T \gamma}{B} \right) \cos(\gamma \mu_B). \quad (5.78)$$

En la Fig. 5.15 se muestran las OM y sus envoltentes, en germaneno, para $T = 3$ K con $elE_z = 25$ meV y $\mu = 0,25$ eV. Debe notarse que debido a la temperatura, no solo se reduce la amplitud de las OM, sino también ocurre un desplazamiento de cada máximo del batido respecto de su ubicación a $T = 0$. De acuerdo a lo obtenido en la sección 4.3.2.2, a cero temperatura estos máximos ocurren en $1/B_M = n/(\omega_1 - \omega_2)$, donde n es un entero. A temperatura finita, los nuevos máximos del batido ocurren cuando $\partial E/\partial B = 0$, y puesto que la envoltente de la temperatura E_d depende de B , luego la solución de $\partial E/\partial B = 0$ no es $1/B_M$. Esto puede observarse en el zoom de la Fig. 5.15, donde la envoltente E_d , calculada considerando los máximos de batido en $1/B_M = n/(\omega_1 - \omega_2)$, no pasan exactamente sobre los extremos de las OM. Por otro lado, los ceros de las OM están fijos en $(n + 1/2)/(\omega_1 - \omega_2)$, la misma ubicación que para $T = 0$. Este resultado puede ser útil desde el punto de vista

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

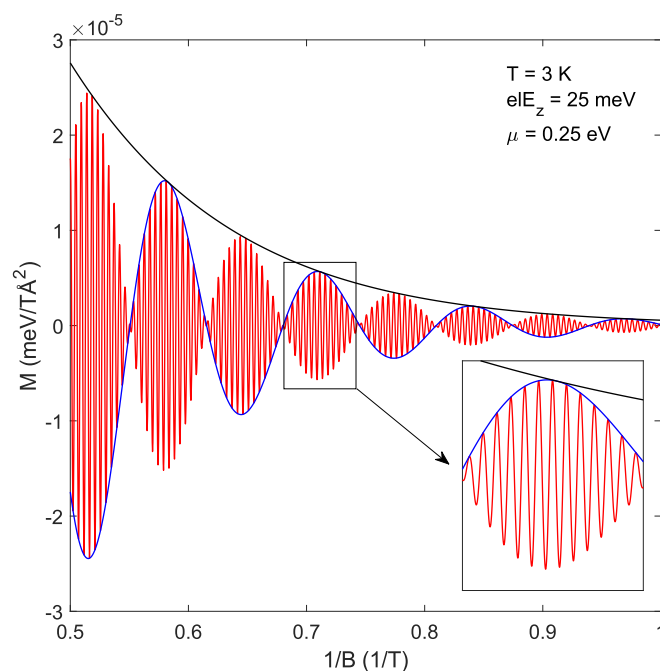


Figura 5.15: OM en germaneno para $T = 3$ K, con $eE_z = 25$ meV y $\mu = 0.25$ eV, tal que $(\omega_1 - \omega_2)/\omega_1 \simeq 0.07$. En esta situación, la *estructura fina* de las OM se pierde, puesto que de la ec. (5.70) se tiene $T_v \simeq 2.6$ K para $1/B = 0.5$ 1/T. Por lo tanto las OM se expresan con la ec. (5.76). En línea azul se muestra la envolvente E dada por la ec. (5.77), mientras que en línea negra la envolvente de decaimiento E_d dada por la ec. (5.78).

experimental, puesto que nos dice que la distancia entre los nodos de las OM es siempre $1/(\omega_1 - \omega_2) = \hbar v_F^2 / 4\lambda_{SO} l E_z$. Así, independientemente de la temperatura, midiendo dónde se encuentran los cero del batido en las OM, uno podría obtener información acerca de los parámetros de los materiales 2D, tales como v_F , λ_{SO} o l .

5.3.6. Efecto de la temperatura para N constante

Los resultados de la sección anterior, en particular la envolvente del batido de las OM, técnicamente son válidos solo para el caso μ constante, como venimos asumiendo. Sin embargo, como ya vimos en el capítulo anterior, sección 4.3.3, el fenómeno de batido en las OM es prácticamente el mismo para los casos N constante o μ constante (ver Fig. 4.15), a pesar de que las oscilaciones internas sean diferentes. En consecuencia, se puede decir que la Fig. 5.15, y las ecuaciones de la envolvente (5.77) y (5.78), resultan una buena descripción incluso para el caso N constante (provisto que el nivel de Fermi μ corresponda a la densidad electrónica del sistema). Esto es aún más justificable teniendo en cuenta que la envolvente de la Fig. 4.15 corresponde a altas temperaturas, tal que el desplazamiento de los extremos alcanzó su valor máximo. En efecto, de acuerdo a lo visto en la sección 5.2.5 para grafeno, las OM para μ se reducen al caso N constante en dicho límite.

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

Las anteriores consideraciones son, en buena aproximación, válidas para el fenómeno de batido. Sin embargo, es de esperar que a bajas temperaturas las OM internas (propias) difieran para los casos μ o N constante, como lo hacen en el estado fundamental. Esto ya fue visto en el caso de grafeno (sección 5.2.5), donde para N constante las OM con bajo decaimiento se observan como las OM en el estado fundamental reducidas (Fig. 5.10). El mismo comportamiento debería observarse en los materiales 2D con *buckling*, aún en presencia de un campo eléctrico que rompe la degeneración de valle.

Como ejemplo, consideramos el caso N constante en siliceno, con los mismos valores considerados en el estado fundamental (sección 4.3.1). En primer lugar, siguiendo la Fig. 4.8, consideramos una densidad electrónica $n_e = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $elE_z = 5 \text{ meV}$, donde las OM en el estado fundamental están dadas por la ec. (4.88). En tal caso no existe degeneración de valle, de manera que $\lambda = 1$, y el último nivel ocupado en el estado fundamental es ε_q , donde $q = \text{floor}[\nu - 1]$ [ec.(4.66)]. Luego, para el sistema prístino la ec. (5.45) queda

$$\nu = 1 + q - c + \sum_{r=q-c}^{q+c} \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon_r - \mu)}}. \quad (5.79)$$

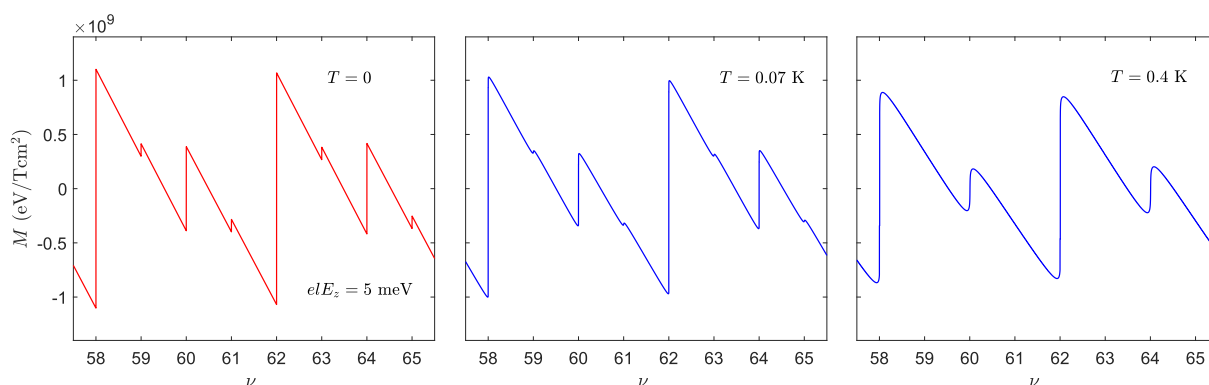


Figura 5.16: OM en siliceno para N constante, con $n_e = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $elE_z = 5 \text{ meV}$. En la primera figura (en rojo) se muestran las OM en el estado fundamental dadas por la ec. (4.88). En azul se muestran las OM a $T = 0,07 \text{ K}$ y $T = 0,4 \text{ K}$, calculadas numéricamente considerando las oscilaciones de μ .

Resolviendo la ecuación anterior para μ , y reemplazando en la ec. (5.65), se obtienen las OM mostradas en la Fig. 5.16, para $T = 0,07 \text{ K}$ y $T = 0,4 \text{ K}$. En la figura de la izquierda (en rojo) se muestran las OM en el estado fundamental dadas por la ec. (4.88). Como se observa, a bajas temperaturas las OM siguen el mismo perfil que a $T = 0$. Esto nos muestra por qué resultó útil estudiar las OM en el estado fundamental, aún si representan un sistema ideal. En efecto, teniendo en cuenta la clasificación de los picos discutida en el capítulo anterior (ver Fig. 4.8), ya podemos entender qué representan las OM que se

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

observan a diferentes temperaturas, cuando las mismas son obtenidas numéricamente. Más aún, sabemos cómo varía la amplitud de cada una de las OM con el campo magnético o eléctrico, puesto que no son otra cosa que las amplitudes A_{LS} , A_S y A_{VS} [ec. (4.74)-(4.76)]. Así, por ejemplo, para una dada temperatura y campo magnético fijo, la variación de las OM con el campo E_z están dadas por las ec. (4.89) y (4.90). Sería difícil obtener dicho resultado considerando solo las OM obtenidas numéricamente con las oscilaciones de μ .

Las dos temperaturas mostradas en la Fig. 5.16 fueron, nuevamente, elegidas para representar cómo la temperatura afecta la observación de las pequeñas oscilaciones en la magnetización. En particular, nos referimos al pico de menor amplitud $A_{VS} = 2n_e\mu_B$ (ver sección 4.3.1.3), que tiene la misma amplitud que los picos S en el caso N constante en grafeno (o materiales 2D con *buckling* para $E_z = 0$). Esto implica que la observación del pico VS dependen de la misma manera con la temperatura que la observación del DE ya estudiado. Así, la temperatura de espín asociada es la ec. (5.68), i.e. $T_s = 2\mu_B B/5k_B$. En otras palabras, la observación del pico VS es factible solo paraⁱ $T < T_s$. Siendo $\nu = n_e/n_B = n_e\phi/B$, se tiene $T_s = 2\mu_B n_e\phi/5\nu k_B$. Considerando los valores de la Fig. 5.16, los picos VS ocurren en $\nu = 59, 61, 63, 65$, lo cual implica $T_s \sim 0,18$ K. Esto se verifica en la Fig. 5.16, donde para $T = 0,07$ K se tiene $T < T_s/2$ y aún se observa el DE asociado a los picos VS. En cambio, para $T = 0,4$ K se tiene $T > T_s$ y los picos VS prácticamente *desaparecen*.

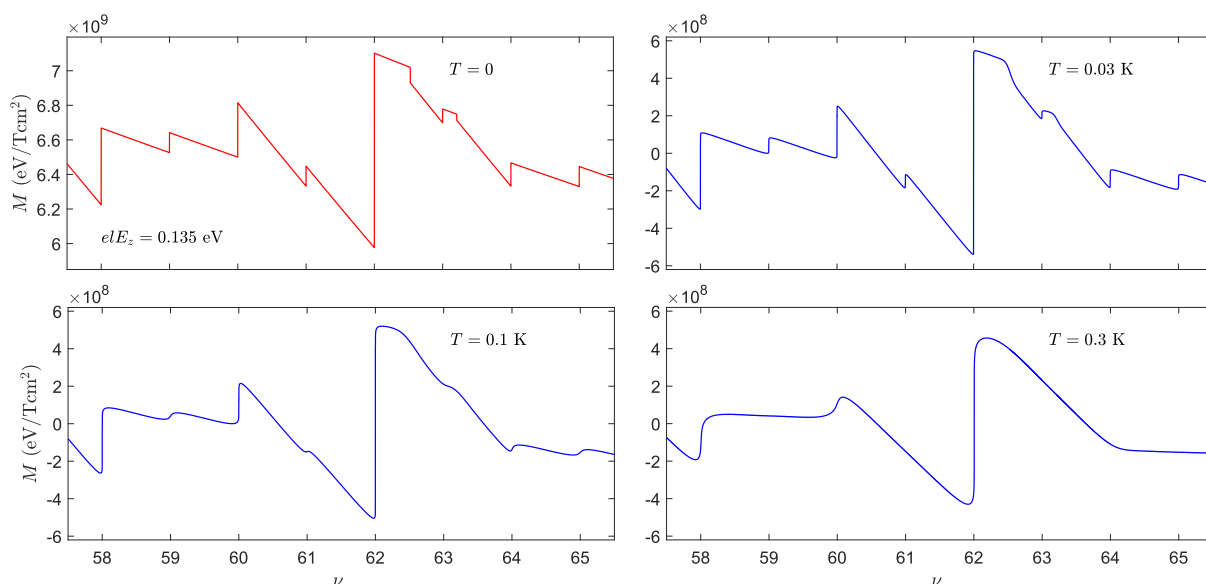


Figura 5.17: Magnetización en siliceno para N constante, con $n_e = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $elE_z = 0,135 \text{ eV}$. En la primer figura (en rojo) se muestran las OM en el estado fundamental calculadas numéricamente de la ec. (4.4). En azul se muestran las OM a distintas temperaturas, calculadas numéricamente considerando las oscilaciones de μ .

ⁱComo ya vimos en la Fig. 5.10, y en la discusión subsiguiente, en el caso N constante la observación es más bien favorecida si $T < T_s/2$.

5. Oscilaciones magnéticas con decaimiento

El efecto de la temperatura también se puede obtener para el caso E_z general, donde los niveles de energía no sigue un ordenamiento fijo (sección 4.3.1.4). Como ejemplo de esta situación, consideramos los valores usados en el estado fundamental, es decir $n_e = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $e l E_z = 0,135 \text{ eV}$. En tal caso el ordenamiento de los niveles de energía está dado por la Fig. 4.7(c), mientras que la magnetización en el estado fundamental se muestra en la Fig. 4.10. El efecto de la temperatura se obtiene de la misma manera que antes, resolviendo la ec. (5.79) para μ y reemplazando en la ec. (5.65). El resultado se muestra en la Fig. 5.17, donde la primer figura (en rojo) son las OM en el estado fundamental calculadas numéricamente de la ec. (4.4) (lo mismo que la Fig. 4.10, en donde además se muestra la clasificación de los picos), mientras que los demás casos son las OM a diferentes temperaturas.

Nuevamente observamos cómo las OM a temperatura no nula siguen el mismo perfil que las OM en el estado fundamental. Esto, de nuevo, ratifica la utilidad del análisis detallado realizado en el capítulo anterior. En efecto, las oscilaciones que aparecen a las distintas temperaturas, y su decaimiento al aumentar T , pueden entenderse fácilmente sabiendo que cada oscilación son los picos (reducidos) que suceden en el estado fundamental. Más aún, siguiendo la clasificación de estos picos realizada en el capítulo anterior (ver Fig. 4.10), uno podría estudiar en detalle cómo dependen la amplitud de estos picos, para una dada temperatura, con los campos magnéticos o eléctricos.

La Fig. 5.17 permite, a su vez, visualizar claramente cómo decaen los detalles finos de las OM al aumentar la temperatura. En $T = 0,03 \text{ K}$ aún se observan la mayoría de los detalles asociados a los picos de magnetización en el estado fundamental. En particular, notar que los picos que ocurren cuando ν no es entero (los cuales disminuyen M al aumentar ν), se ven como pequeños cambios de pendiente en las OM. Al seguir aumentando la temperatura, los detalles de las OM progresivamente desaparecen. Ya en $T = 0,1 \text{ K}$ se observa una reducción apreciable de las OM, aunque aún se mantiene en gran medida el mismo perfil que a $T = 0$. Sin embargo, a mayor temperatura $T = 0,3 \text{ K}$ solo sobreviven las OM de mayor amplitud, habiendo prácticamente una total pérdida de las pequeñas oscilaciones.

Capítulo 6

Momentos magnéticos locales

Al adsorber un átomo en grafeno, la hibridización de éste con la red, junto con la interacción electrónica, puede dar lugar a la formación de momentos magnéticos locales. Es decir, la población de espines en la impureza es diferente. Este fenómeno ya ha sido extensamente estudiado para la adsorción de iones solubles en metales, mediante el modelo de Anderson. Dicho modelo se puede aplicar en grafeno, teniendo en cuenta las propiedades bidimensionales de la red. Así, uno puede distinguir entre adsorción de la impureza en sitio *top* o *hollow*, por ejemplo, donde en cada caso la hibridización con los átomos de C en grafeno es distinta.

En este capítulo se realiza un estudio de la formación de momentos magnéticos en grafeno, utilizando el modelo de Anderson para la adsorción de una impureza en sitio *top* o *hollow*. Se describe cómo es la hibridización de la impureza con los átomos de grafeno, y se obtienen expresiones analíticas para la DOS en la impureza. A partir de esto, se resuelve numéricamente el sistema de ecuaciones autoconsistentes, y se estudian las condiciones para la formación de momentos magnéticos. En particular, se calculan las curvas que definen la transición de las regiones magnético-no magnético, y su dependencia con la energía de Fermi μ , la energía de hibridización V , el parámetro de Hubbard U y la energía en la impureza.

6.1. Modelo de Anderson en grafeno

La formación de momentos magnéticos locales se estudia con el modelo de Anderson, introducido en la sección 1.4 y explicado en detalle en la sección 2.3. Este modelo, originalmente concebido para la adsorción de iones solubles en metales no magnéticos, se puede extender a los materiales 2D como el grafeno, como fue descrito en la sección 1.4.2. Allí se vio el caso de adsorción de una única impureza en un sitio *top* de la subred B de grafeno^[123]. El resultado obtenido, Fig. 1.3, contrasta con el caso metálico^[118] (Fig. 1.2) en que la curva de transición magnético-no magnético no es simétrica para $\epsilon_0 > 0$ y $\epsilon_0 < 0$, donde ϵ_0 es la energía en la impureza (medida respecto del punto de Dirac).

6. Momentos magnéticos locales

La adsorción de un átomo en un sitio *top* de la red de grafeno es la más simple posible, pero no es la única. De hecho, simulaciones a temperatura ambiente han demostrado que los átomos adsorbidos pueden ser movidos de una posición a otra, existiendo dos mínimos de energía cuando los átomos son adsorbidos en los sitios *hollow* (centro del hexágono) y sitio *bridge*. En ambas posiciones, grafeno preserva su forma plana, con pocas distorsiones en la geometría de los enlaces C-C cerca del átomo adsorbido. En general, se espera que casi todos los átomos pesados adsorbidos en sitios *hollow* hibridizen con los átomos C de la red de grafeno. La mayoría hibridiza a través de los orbitales *s*, *d* o *f*.

Teniendo en cuenta esto, en lo que sigue consideraremos, por simpleza, que la adsorción de un átomo en un sitio *hollow* (en el centro de la red hexagonal) no distorsiona la estructura cristalina. Es decir, se preserva la simetría de la red de grafeno. La adsorción en un sitio *hollow* se muestra esquemáticamente en la Fig. 6.1, donde una impureza (en verde) en un sitio *hollow* interactúa con los 6 primeros vecinos de la red de grafeno.

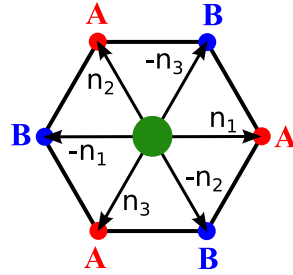


Figura 6.1: Adsorción de una impureza (en verde) en un sitio *hollow* de la red de grafeno. La impureza se hibridiza con las subredes *A* y *B*, en los 6 sitios mostrados, cuyas distancias están dadas por los vectores a primeros vecinos \mathbf{n}_1 , \mathbf{n}_2 y \mathbf{n}_3 .

Siguiendo entonces el modelo de Anderson, el Hamiltoniano del sistema es

$$H = H_0 + H_V + H_F. \quad (6.1)$$

Aquí H_0 es el Hamiltoniano en grafeno libre con interacción a primeros vecinos, asumiendo que la red de grafeno no se altera por la adsorción. Teniendo en cuenta el espín σ de los electrones, de la ec. (3.1) se tiene

$$H_0 = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(a_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} + b_{j,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma} \right), \quad (6.2)$$

donde $a_{i,\sigma}^\dagger$ ($a_{i,\sigma}$) crea (aniquila) un electrón en un sitio \mathbf{r}_i de la subred *A*, con espín σ , mientras que $b_{i,\sigma}^\dagger$ ($b_{i,\sigma}$) crea (aniquila) un electrón en un sitio \mathbf{r}_i en la subred *B* con espín σ (como antes, el parámetro $t \simeq 2,8$ eV es la integral de solapamiento a primeros vecinos). El Hamiltoniano H_0 , escrito en el espacio real, puede ser llevado al espacio de momento

6. Momentos magnéticos locales

considerando la transformada de Fourier de los operadores creación y destrucción, dadas por $a_{i,\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_{\mathbf{k},\sigma}/\sqrt{N}$ y $b_{i,\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} b_{\mathbf{k},\sigma}/\sqrt{N}$, donde N es el número de celda primitivas en la red de grafeno. Remplazando en H_0 se obtiene

$$H_0 = -t \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left[\phi_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k},\sigma} + \phi_{\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k},\sigma} \right], \quad (6.3)$$

donde $\phi_{\mathbf{k}} = \sum_{i=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}_i}$, siendo \mathbf{n}_i las distancias a primeros vecinos en la red de grafeno (sección 3.1.2), dadas por

$$\mathbf{n}_1 = d\mathbf{e}_x \quad (6.4)$$

$$\mathbf{n}_2 = d \left(-\mathbf{e}_x + \sqrt{3}\mathbf{e}_y \right) / 2 \quad (6.5)$$

$$\mathbf{n}_3 = -d \left(\mathbf{e}_x + \sqrt{3}\mathbf{e}_y \right) / 2. \quad (6.6)$$

Por otra parte, el término H_V representa la hibridización entre el átomo adsorbido y la red de grafeno. Como ya se mencionó, para adsorción en un sitio *hollow* debemos considerar la hibridización de los 6 C del hexágono de grafeno (Fig. 6.1). En otras palabras, el átomo adsorbido se hibridiza con ambas subredes del grafeno. Por lo tanto, la forma general del Hamiltoniano de hibridización es

$$H_V = \sum_{\sigma=1}^2 \sum_{i=1}^3 \left[V_{a,i} a_{\sigma}^\dagger(\mathbf{n}_i) + V_{b,i} b_{\sigma}^\dagger(-\mathbf{n}_i) \right] f_{\sigma} + h.c., \quad (6.7)$$

donde $f_{\sigma}^\dagger (f_{\sigma})$ es el operador de creación (destrucción) del átomo adsorbido, con espín σ , mientras que $V_{a/b,i}$ son los parámetros de hibridización con las subredes A y B . Notar que el átomo adsorbido, al estar en sitio *hollow*, interactúa con los tres primeros vecinos de las subredes, con distancias \mathbf{n}_i . Las expresiones de $V_{x,i}$ ($x = A, B$) están dictadas solo por las simetrías del orbital involucrado en la hibridización. En particular, se tiene $V_{a,i} \equiv V = (-1)^\gamma V_{b,i}$, donde $\gamma = 0$ para un orbital s y $\gamma = 1$ para un orbital f [201]. Considerando la transformada de Fourier de los operadores a_{σ}^\dagger y b_{σ}^\dagger , el Hamiltoniano H_V puede escribirse como

$$H_V = \sum_{\sigma=1}^2 \left[V_{a,\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + V_{b,\mathbf{k}} b_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \right] f_{\sigma} + h.c., \quad (6.8)$$

donde se definió

$$V_{a,\mathbf{k}} = \sum_{i=1}^3 V_{a,i} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}_i} = V \phi_{\mathbf{k}}^* \quad (6.9)$$

6. Momentos magnéticos locales

$$V_{b,\mathbf{k}} = \sum_{i=1}^3 V_{b,i} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}_i} = (-1)^\gamma V \phi_{\mathbf{k}}. \quad (6.10)$$

Finalmente, el término H_F en la ec. (6.1) representa el Hamiltoniano en la impureza, con expresión

$$H_F = \varepsilon_0 \sum_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}. \quad (6.11)$$

El primer término es la energía ε_0 en la impurezaⁱ, siendo $n_{\sigma} = f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma}$ el número de ocupación con espín σ en la impureza. El segundo término en H_F es el Hamiltoniano de Hubbard para la interacción electrónica a corto alcance, donde U es la intensidad de la correlación electrónica de los estados en las capas internas (*inner shell*) de la impureza (ver sección 2.2.3). Considerando la aproximación de campo medio, la correlación de los electrones en la impurezas puede descomponerse como^[161]

$$U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \sim \sum_{\sigma} U \langle n_{-\sigma} \rangle f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} - U \langle n_{d\uparrow} \rangle \langle n_{d\downarrow} \rangle, \quad (6.12)$$

donde $\langle n_{\sigma} \rangle$ es el número de ocupación en la impureza (no es un operador). De esta manera, quedándose solo a primer orden en $\langle n_{\sigma} \rangle$ (i.e. despreciando el último término en la ecuación anterior), el Hamiltoniano H_F queda

$$H_F = \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma}, \quad (6.13)$$

donde se definió $\varepsilon_{\sigma} = \varepsilon_0 + U \langle n_{-\sigma} \rangle$, lo cual vendría a ser la energía de los electrones en la impureza en presencia de una interacción repulsiva dada por el parámetro U .

Para seguir, conviene primero reescribir el Hamiltoniano (6.1) en la base de operadores que diagonalizan a H_0 . Ya vimos que estos operadores tienen la expresión [ec. (3.3)]

$$c_{\sigma,\mathbf{k}}^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(b_{\sigma,\mathbf{k}} \pm \frac{\phi_{\mathbf{k}}^*}{|\phi_{\mathbf{k}}|} a_{\sigma,\mathbf{k}} \right), \quad (6.14)$$

Escritos en esta base, los Hamiltonianos H_0 y H_V quedan

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \left[c_{\sigma,\mathbf{k}}^{(+)\dagger} c_{\sigma,\mathbf{k}}^{(+)} - c_{\sigma,\mathbf{k}}^{(-)\dagger} c_{\sigma,\mathbf{k}}^{(-)} \right] \quad (6.15)$$

$$H_V = \sum_{\alpha=\pm 1} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \Theta_{\mathbf{k}\alpha} c_{\sigma,\mathbf{k}}^{(\alpha)\dagger} f_{\sigma} + h.c., \quad (6.16)$$

ⁱEsta energía está medida en relación a la energía de sitio de los átomos de C en la red de grafeno.

6. Momentos magnéticos locales

donde $\varepsilon_{\mathbf{k}} = t |\phi_{\mathbf{k}}|$ es la relación de dispersión en grafeno, y definimos

$$\Theta_{\mathbf{k}\alpha} = \frac{V}{\sqrt{2}} \left[\phi_{\mathbf{k}} + \alpha (-1)^\gamma \frac{\phi_{\mathbf{k}}^* \phi_{\mathbf{k}}}{|\phi_{\mathbf{k}}|} \right]. \quad (6.17)$$

La expresión $\Theta_{\mathbf{k}\alpha}$ es una generalización de la ecuación (5) en [201]. Así escrito, el Hamiltoniano H_V nos dice que la impureza se hibridiza con las bandas de conducción y valencia a través del parámetro de hibridización $\Theta_{\mathbf{k}\alpha}$.

6.1.1. Densidad de estados en la impureza

Para estudiar la formación de momentos magnético locales, debemos calcular el número de ocupación n_σ de espín σ en la impurezaⁱ. Si el nivel de Fermi es μ , en el estado fundamental ($T = 0$) el número de estados completamente ocupados con espín σ es

$$n_\sigma = \int_{-D}^{\mu} \rho_\sigma(\omega) d\omega, \quad (6.18)$$

donde $\rho_\sigma(\omega) = -\text{Im}G_\sigma(\omega)/\pi$ es la densidad de estados (DOS) locales en la impureza, siendo G_σ la función de Green en la impureza. En la ec. (6.18), D es el ancho de banda. La función de Green G_σ es la componente en la banda de las impurezas de la función de Green total del sistema G , la cual se calcula a partir de la relación $G = [z - H]^{-1}$, siendo $H = H_0 + H_V + H_F$ el Hamiltoniano total del sistema. Usando la base de los operadores $c_{\sigma,\mathbf{k}}^{(\pm)}$ y f_σ , con las expresiones de H_0 y H_V dadas por las ec. (6.15) y (6.16), en forma matricial para cada espín σ se tiene

$$H_{\mathbf{k}\sigma} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} & 0 & \Theta_{\mathbf{k}+} \\ 0 & -\varepsilon_{\mathbf{k}} & \Theta_{\mathbf{k}-} \\ \Theta_{\mathbf{k}+}^* & \Theta_{\mathbf{k}-}^* & \varepsilon_\sigma \end{bmatrix}. \quad (6.19)$$

Notar que la dependencia del espín solo aparece en la impureza, a través del término $\varepsilon_\sigma = \varepsilon_0 + U n_{-\sigma}$. Tomando la inversa de $zI - H_\sigma$ (donde $z = \omega + i0^+$ e I es la matriz identidad) y proyectando sobre la impureza, se obtiene la función de Green

$$G_\sigma = \frac{1}{z - \varepsilon_\sigma - \Sigma}, \quad (6.20)$$

donde

$$\Sigma = \sum_{\alpha=\pm 1} \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\Theta_{\mathbf{k}\alpha}|^2}{z - \alpha \varepsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (6.21)$$

ⁱDe aquí en adelante, para simplificar la notación, obviaremos los brackets en los números de ocupación, entendiéndose que $n_\sigma = \langle n_\sigma \rangle$ representa la ocupación del espín σ en la impureza, y no el operador de número.

6. Momentos magnéticos locales

Cabe destacar que, de acuerdo a la expresión de G_σ , la función Σ vendría a ser la autoenergía local debido a la hibridización. La DOS local en la impureza queda

$$\rho_\sigma(\omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{\text{Im}\Sigma}{(Z^{-1}\omega - \varepsilon_\sigma)^2 + (\text{Im}\Sigma)^2}, \quad (6.22)$$

donde $Z^{-1} = 1 - \text{Re}\Sigma/\omega$ es el residuo de Σ . La parte real de Σ produce un desplazamiento en la energía ε_σ de la impureza, mientras que la parte imaginaria de Σ produce un ensanchamiento de la DOS en la impureza. Siendo $z = \omega + i0^+$, de la ec. (6.21) se tiene

$$\text{Re}\Sigma = \sum_{\alpha=\pm 1} \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\Theta_{\mathbf{k}\alpha}|^2}{\omega - \alpha\varepsilon_{\mathbf{k}}} \quad (6.23)$$

$$\text{Im}\Sigma = - \sum_{\alpha=\pm 1} \sum_{\mathbf{k}} \pi |\Theta_{\mathbf{k}\alpha}|^2 \delta(\omega - \alpha\varepsilon_{\mathbf{k}}). \quad (6.24)$$

Teniendo en cuenta la ec. (6.17), se puede escribir

$$|\Theta_{\mathbf{k}\alpha}|^2 = V^2 \left\{ |\phi_{\mathbf{k}}|^2 + \frac{\alpha(-1)^\gamma}{2|\phi_{\mathbf{k}}|} [\phi_{\mathbf{k}}^3 + (\phi_{\mathbf{k}}^*)^3] \right\}. \quad (6.25)$$

En la aproximación de onda larga, válida para $\mu \ll t \sim 3$ eV, la función $\phi_{\mathbf{k}}$ se expande alrededor de los valles K y K' en grafeno, los cuales coinciden con los límites de la primera zona de Brillouin (1ZB). Para el valle K se tiene $\phi_{\mathbf{k}} = \hbar v_F (k_x + ik_y)$, donde $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ son los vectores medidos desde la 1ZB y $v_F \sim 10^6$ m/s es la velocidad de Fermi (ver sección 3.1.4). Esto implica $\phi_{\mathbf{k}} = |\phi_{\mathbf{k}}| e^{i\theta}$, donde $|\phi_{\mathbf{k}}| = |\mathbf{k}| \equiv k$ y $\theta = \arctan(k_y/k_x)$, tal que $k_x = k \cos \theta$ y $k_y = k \sin \theta$. Así, en la aproximación de onda larga se tiene $\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 = t^2 |\phi_{\mathbf{k}}|^2 = \hbar^2 v_F^2 k^2$ y $\phi_{\mathbf{k}}^3 + (\phi_{\mathbf{k}}^*)^3 = 2|\phi_{\mathbf{k}}|^3 \cos(3\theta)$. Luego la ec. (6.25) queda

$$|\Theta_{\mathbf{k}\alpha}|^2 = \left(\frac{V\hbar v_F k}{t} \right)^2 [1 + \alpha(-1)^\gamma \cos(3\theta)]. \quad (6.26)$$

De aquí resulta

$$|\Theta_{k+}|^2 + |\Theta_{k-}|^2 = 2(V\hbar v_F k/t)^2 \quad (6.27)$$

$$|\Theta_{k+}|^2 - |\Theta_{k-}|^2 = 2(V\hbar v_F k/t)^2 (-1)^\gamma \cos(3\theta). \quad (6.28)$$

Por lo tanto la ec. (6.23) se puede escribir como

$$\text{Re}\Sigma = \sum_{\mathbf{k}} \frac{2}{\omega^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2} \left(\frac{V\hbar v_F k}{t} \right)^2 [\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}} (-1)^\gamma \cos(3\theta)]. \quad (6.29)$$

6. Momentos magnéticos locales

La sumatorias en \mathbf{k} se reemplazan por integrales con un ancho de banda $D = 7$ eV, considerando la condición de Debye tal que se preserva la cantidad de estados en la 1ZB^[123]. Es decir, $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow (\mathcal{A}/4\pi^2) \int d^2\mathbf{k}$, tal que $2/\mathcal{A} = \int_{-D}^D \rho(\varepsilon) d\varepsilon$ siendo $\rho(\varepsilon) = |\varepsilon|/2\pi\hbar^2v_F^2$ la DOS en grafeno a bajas energías (por valle y espín) [ec. (3.13)]. Luego $2/\mathcal{A} = D^2/\pi\hbar^2v_F^2$ y la DOS total queda $\rho_t(\varepsilon) = |\varepsilon|/D^2$ ^[201]. La integral en \mathbf{k} conviene hacerla en coordenadas polares, de forma que $\int d^2\mathbf{k} = \int_0^{2\pi} \int_0^{k_F} k dk d\theta$ con $\hbar^2v_F^2k_F^2 = D^2$. Para la parte real de Σ se obtiene

$$\text{Re}\Sigma(\omega) = -\frac{\xi_H}{\pi}\omega \left[D^2 + \omega^2 \ln \left(\frac{|\omega^2 - D^2|}{\omega^2} \right) \right], \quad (6.30)$$

donde $\xi_H = \pi V^2/(tD)^2$. Para la parte imaginaria de Σ , dada por la ec. (6.24), conviene hacer la integral en \mathbf{k} utilizando la propiedad $\delta[g(x)] = \delta(x - x_0)/|g'(x_0)|$, de forma que

$$\delta(\omega - \alpha\varepsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{\delta(k - \alpha\omega/\hbar v_F)}{\hbar v_F}. \quad (6.31)$$

Por lo tanto integrando la ec. (6.24) en coordenadas polares se obtiene

$$\text{Im}\Sigma(\omega) = -\xi_H |\omega|^3. \quad (6.32)$$

Es instructivo comparar estos resultados con la impureza adsorbida en un sitio *top*, donde la parte real e imaginaria de la autoenergía Σ son^[123]

$$\text{Re}\Sigma(\omega) = -\frac{\xi_T}{\pi}\omega \ln \left(\frac{|\omega^2 - D^2|}{\omega^2} \right) \quad (6.33)$$

$$\text{Im}\Sigma(\omega) = -\xi_T |\omega|, \quad (6.34)$$

donde $\xi_T = \pi V^2/D^2$. Esto nos dice que el desplazamiento (residuo) y el ensanchamiento de la energía en la impureza cambia significativamente dependiendo si se adsorbe en un sitio *top* o *hollow*. En particular, la parte imaginaria (que da la DOS en la impureza) depende de la energía como $|\omega|$ en un sitio *top*, mientras que depende como $|\omega|^3$ en un sitio *hollow*. A su vez, en un sitio *hollow* $\text{Im}\Sigma$ depende de la integral de solapamiento $t \sim 3$ eV, no siendo éste el caso en para el sitio *top*.

Teniendo en cuenta entonces las expresiones para la parte real e imaginaria de $\Sigma(\omega)$, para los sitios *top* y *hollow*, la DOS en la impureza (6.22) resulta

$$\rho_{\sigma}^T(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\xi_T |\omega|}{(Z_T^{-1}\omega - \varepsilon_{\sigma})^2 + \xi_T^2 \omega^2} \quad (6.35)$$

$$\rho_{\sigma}^H(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\xi_H |\omega|^3}{(Z_H^{-1}\omega - \varepsilon_{\sigma})^2 + \xi_H^2 \omega^6}. \quad (6.36)$$

6. Momentos magnéticos locales

6.1.2. Formación de momentos magnéticos locales

En general, la formación de momentos magnéticos locales se determina por la ocupación de los espines en la impureza, habiendo momento magnético solo si $n_{\uparrow} \neq n_{\downarrow}$. Puesto que $\varepsilon_{\sigma} = \varepsilon_0 + Un_{-\sigma}$, la obtención de n_{\uparrow} y n_{\downarrow} se realiza de manera autoconsistente a través de la integral (6.18), utilizando las DOS dadas por las ec. (6.35) y (6.36). En la Fig. 6.2 se muestran los números de ocupación n_{\uparrow} y n_{\downarrow} como función de μ , para adsorción de la impureza en sitios *top* y *hollow*, considerando $\varepsilon_0 = 0,203$ eV, $V = 1$ eV, con $U = 0,1$ eV (figuras superiores) y $U = 0,01$ eV (figuras inferiores). Como se aprecia, dependiendo del valor de U existe un rango de μ en el cual $n_{\uparrow} \neq n_{\downarrow}$ y por lo tanto se produce un momento magnético local en la impureza. La forma en la que dicha magnetización ocurre es diferente dependiendo si la adsorción es en un sitio *top* o *hollow*.

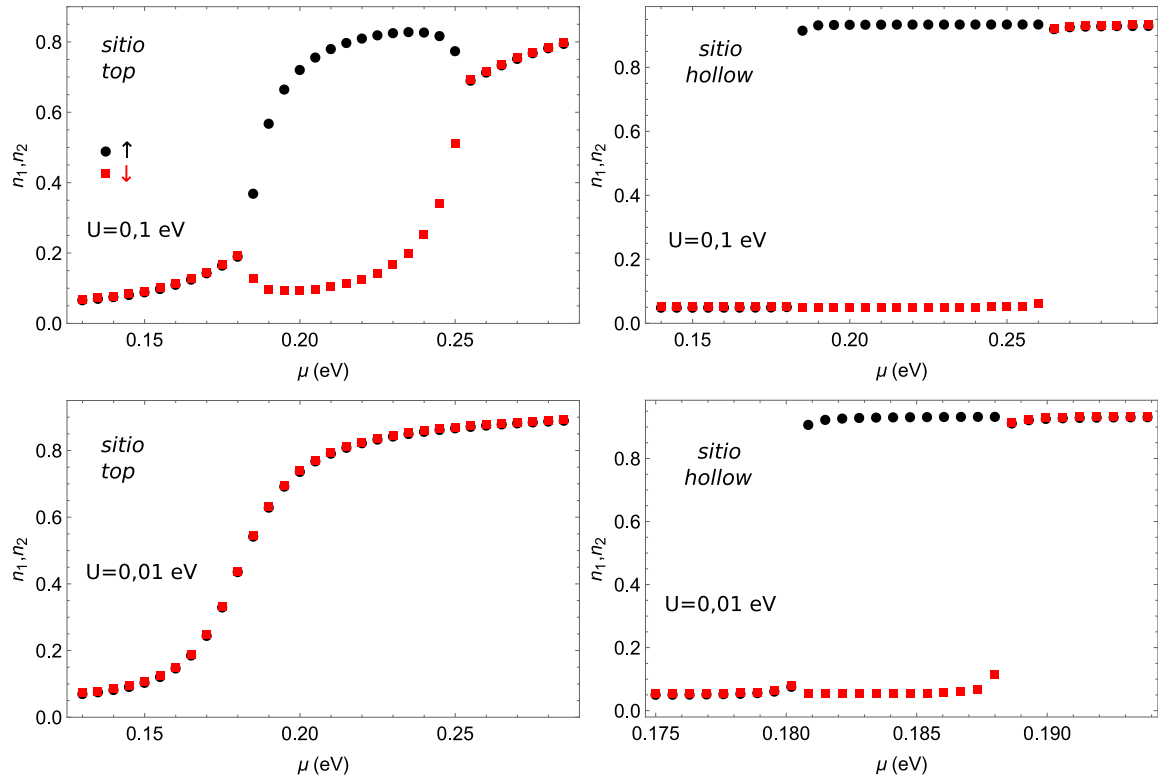


Figura 6.2: Ocupación de los espines en la impureza, como función del nivel de Fermi μ , para adsorción en sitio *top* y *hollow*. Se consideró $\varepsilon_0 = 0,203$ eV, $V = 1$ eV, con $U = 0,1$ eV (figuras superiores) y $U = 0,01$ eV (figuras inferiores).

Cuando $U = 0,1$ eV (Fig. 6.2 superiores) se produce formación de momento magnético en ambos sitios, aunque la ocupación de los espines difiere según el sitio de adsorción. Para el sitio *top*, partiendo desde $\mu \sim 0,15$ eV vemos que al aumentar μ aumenta la ocupación en la impureza, pero de la misma manera en ambos espines. Cuando se llega a la aparición de momento magnético ($\mu \simeq 0,18$ eV), la ocupación de uno de los espines decrece, mientras la

6. Momentos magnéticos locales

del otro aumenta. Dicho comportamiento, donde $n_{\uparrow} \neq n_{\downarrow}$ y hay momento magnético local, se mantiene hasta $\mu \simeq 0,25$ eV. A partir de entonces $n_{\uparrow} = n_{\downarrow}$, pero a un mayor valor que antes de la aparición de momento magnético. El rango de μ para el cual hay magnetismo está en concordancia con estudios previos^[123]. Para el sitio *hollow* se observa algo semejante con $U = 0,1$ eV, donde hay magnetismo para un rango similar de μ . Sin embargo, la variación en la ocupación de los espines que da lugar al momento magnético es distinta. Esto implica que la magnitud del momento magnético $\mu_B (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})$ depende del sitio de adsorción.

Cuando el parámetro de Hubbard decrece a $U = 0,01$ eV (Fig. 6.2 inferiores) se observa que la formación de momento magnético depende del sitio de adsorción. En efecto, para este valor de U ya no hay magnetismo para el sitio *top*: al variar μ ambos espines cambian la ocupación pero de la misma manera. En contraste, para el sitio *hollow* sí se observa formación de momento magnético, aunque en un rango mucho más acotado de μ , en comparación con el caso $U = 0,1$ eV. Esto es de esperar, puesto que mientras menor es U , menor es el rango entre ε_0 y $\varepsilon_0 + U$ sobre el cual se espera que haya momento magnético (ver Fig. 1.3). De esta manera se observa cómo la formación de momentos magnéticos en grafeno depende no solo de los parámetros μ y U , sino también del sitio de adsorción.

La Fig. 6.2 muestra, a su vez, cómo influye el ensanchamiento anómalo de la DOS de la impureza en la formación de momentos magnético. En efecto, en base al comportamiento observado en metales uno esperaría formación de momento magnético para $\varepsilon_0 < \mu < \varepsilon_0 + U$ (ver sección 1.4). Para $\varepsilon_0 = 0,203$ eV y $U = 0,1$ eV, esto implica $0,203 < \mu$ (eV) $< 0,303$, pero en la Fig. 6.2 vemos que en ambos sitios de adsorción hay momento magnético solo si $0,18 \lesssim \mu$ (eV) $\lesssim 0,25$. Esta discrepancia se debe al efecto del ensanchamiento y el desplazamiento de la energía en la impureza, la cual implica por ejemplo que haya momento magnético incluso si $\mu < \varepsilon_0$ ^[123].

La formación de momento magnético no solo depende de U , sino también de la energía de hibridización V de la impureza con la red de grafeno. Esto puede observarse en la Fig. 6.3, donde se muestra la ocupación de los espines para diferentes valores de hibridización, con $\varepsilon_0 = 0,203$ eV y $U = 0,1$ eV. El patrón observado es que, en ambos sitios de adsorción, el rango de μ para los cuales se forma momento magnético disminuye al aumentar V . En particular, cuando $V = 1,4$ eV se observa momento magnético en ambos sitios, pero en un rango menor de μ en comparación con el caso $V = 1$ eV de las Fig. 6.3 superiores (para $U = 0,1$ eV). La tendencia parece ser que no solo se acota el rango de μ para el cual hay magnetismo, sino también el valor de μ a partir del cual empieza a formarse el momento magnético. En el caso $V = 2,1$ eV (Fig. 6.3 inferiores), vemos que el momento magnético desaparece para el sitio *top*. En cambio, el momento magnético persiste en el sitio *hollow*, aunque en un rango más acotado de μ en comparación con el caso $V = 1,4$ eV. Este comportamiento es similar a lo que sucede al disminuir U (Fig. 6.2 inferiores).

6. Momentos magnéticos locales

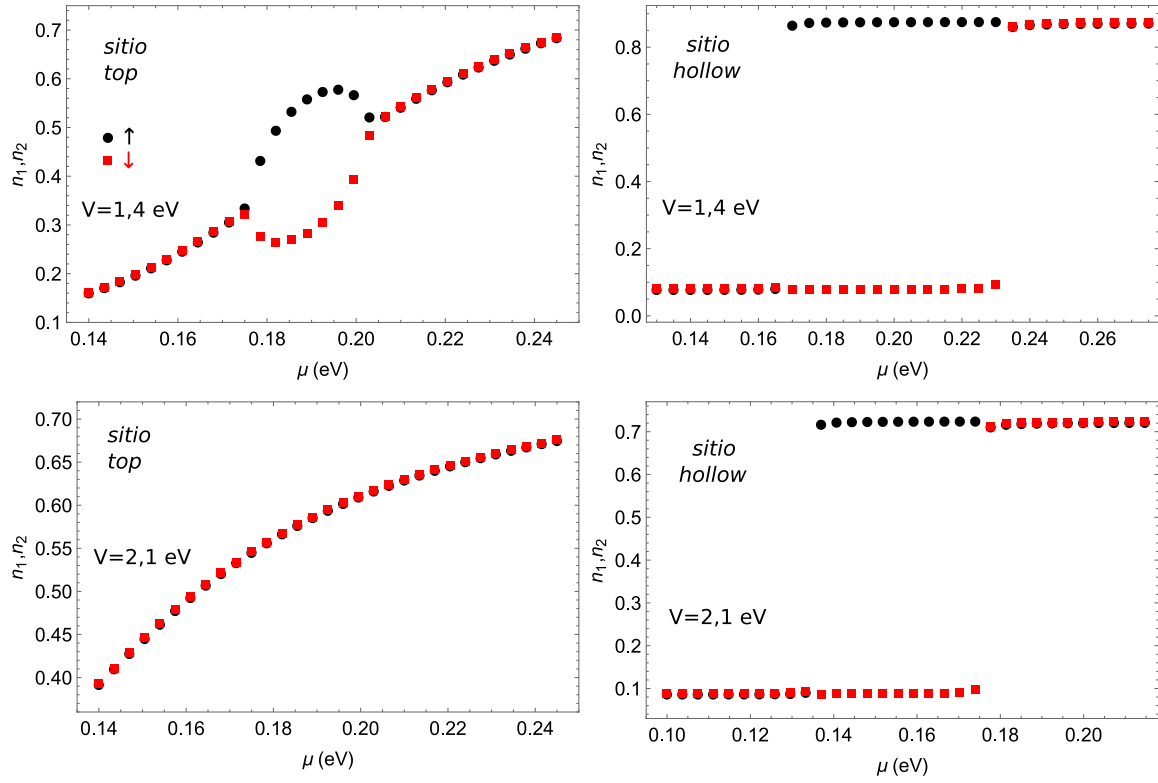


Figura 6.3: Ocupación de los espines en la impureza, como función del nivel de Fermi μ , para adsorción en sitio *top* y *hollow*. Se consideró $\varepsilon_0 = 0,203$ eV, $U = 0,1$ eV, con $V = 1,4$ eV (figuras superiores) y $V = 2,1$ eV (figuras inferiores).

La formación de momento magnético depende, a su vez, de la energía en la impureza ε_0 . Esto se observa en la Fig. 6.4, donde se muestra la ocupación de los espines para $V = 1$ eV, $U = 0,1$ eV, con $\varepsilon_0 = 0,301$ eV (figuras superiores) y $\varepsilon_0 = 0,56$ eV (figuras inferiores). Nuevamente se ve cómo la formación de momento magnético, y su dependencia con μ , es diferente dependiendo del sitio de adsorción. Para $\varepsilon_0 = 0,301$ eV se observa momento magnético en los dos sitios de adsorción, en un rango de μ muy parecido en ambos casos. Sin embargo, al aumentar la energía en la impureza, el momento magnético desaparece en el sitio *top* pero se mantiene en el sitio *hollow*, como se observa para $\varepsilon_0 = 0,56$ eV. Es decir, al aumentar ε_0 se observa el mismo patrón que al aumentar V o disminuir U .

Las figuras anteriores indican que, en términos generales, la formación de momento magnético depende fuertemente de μ , U , V y ε_0 , lo cual tiene incidencia en qué tan probable sea que una dada impureza adquiera momento magnético al adsorberse en la red de grafeno. A su vez, la formación de momento magnético depende del sitio de adsorción. En particular, la adsorción de la impureza en un sitio *hollow* implica que se formen momentos magnético para valores de U^{-1} , V y ε_0 más grandes que los necesarios para el sitio *top*. Aún así, en ambos sitios de adsorción se mantiene un comportamiento universal, tal que la formación de momento magnético se favorece a mayor U y menor V y ε_0 .

6. Momentos magnéticos locales

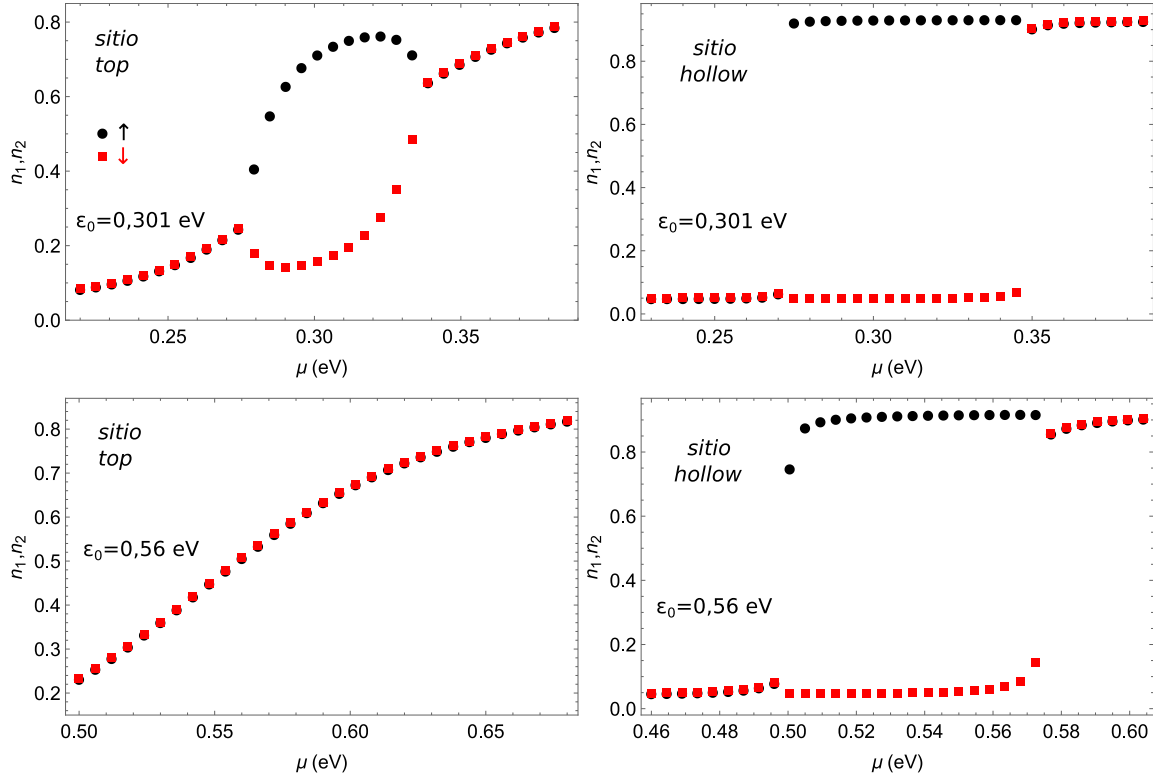


Figura 6.4: Ocupación de los espines en la impureza, como función del nivel de Fermi μ , para adsorción en sitio *top* y *hollow*. Se consideró $V = 1$ eV, $U = 0,1$ eV, con $\epsilon_0 = 0,301$ eV (figuras superiores) y $\epsilon_0 = 0,56$ eV (figuras inferiores).

6.1.3. Transición magnética

Al estudiar la formación de momentos magnéticos nos interesa particularmente obtener la curva de transición magnética, donde se pasa de magnetismo a no magnetismo. En esta sección estudiaremos la transición magnética en función de μ y los parámetros V , U y ϵ_0 . Esto es, en efecto, lo reportado originalmente por Anderson^[118] y estudios posteriores^[123]. Para obtener la transición magnética se resuelve la ecuación autoconsistente (6.18) de manera numérica, para diferentes valores de V , U o ϵ_0 , y se registra la diferencia de ocupación de los espines en la impureza.

En la Fig. 6.5 se muestra el gráfico de densidad para la diferencia de espines en la impureza, como función de V y μ , con $\epsilon_0 = 0,203$ eV y $U = 0,1$ eV fijos. En ambos sitios de adsorción se observa que la formación de momento magnético decrece al aumentar V , en concordancia con la Fig. 6.3. Sin embargo, dicha dependencia, y el rango de μ donde hay momento magnético, dependen significativamente del sitio de adsorción. Para el sitio *top* vemos que la curva de transición magnética es asimétrica^[123], en contraste con el caso metálico^[118]. El límite de V para el cual se observa momento magnético es $V \sim 1,5$ eV en $\mu \sim 0,18$ eV. Es decir, para $\epsilon_0 = 0,203$ eV y $U = 0,1$ eV, no se espera que se forme momento magnético para adsorción en sitio *top* si $V \gtrsim 1,5$ eV.

6. Momentos magnéticos locales

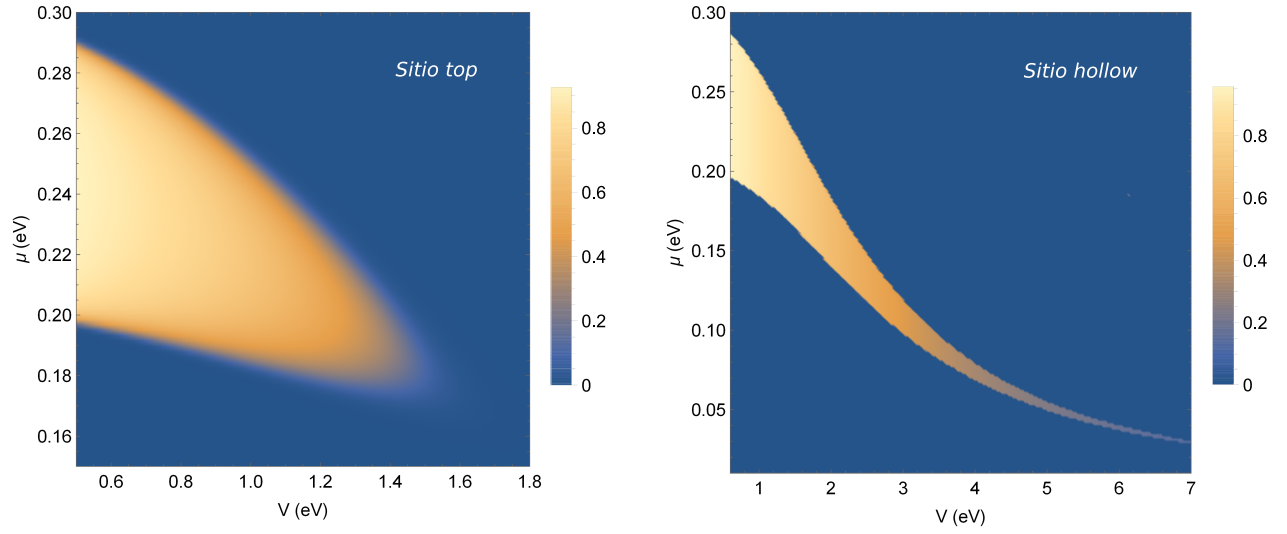


Figura 6.5: Gráfico de densidad para la diferencia de espines en la impureza, como función de V y μ , con $\varepsilon_0 = 0,203$ eV y $U = 0,1$ eV.

En contraste, en la Fig. 6.5 para el sitio *hollow* vemos que la formación de momento magnético se extiende para un rango de V mucho más extenso. A su vez se observa una dependencia no trivial con el rango de μ donde hay magnetismo. La diferencia respecto del sitio *top* es tal que en el sitio *hollow* se observa formación de momento magnético incluso para valores $V \sim 6$ eV, aunque debe decirse que esto solo sucede en un rango muy acotado de valores pequeños de μ , cercanos al punto de Dirac. A bajo V se observa, en cambio, que la transición magnética se asemeja a la del sitio *top*, en particular para $V \lesssim 1$ eV. En tal caso la diferencia entre ambos sitios de adsorción reside principalmente en la magnitud del momento magnético (i.e. de $n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$), como se observa la Fig. 6.5. Para el sitio *top* la diferencia ($n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$) disminuye al aproximarse a los bordes de la transición magnética, en concordancia con la forma de la ocupación de los espines según la Fig. 6.3. En cambio, para el sitio *hollow* a bajo V vemos que la diferencia ($n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$) se mantiene prácticamente la misma (~ 1) en todo el rango de μ donde hay magnetismo.

En la Fig. 6.6 se muestra el gráfico de densidad para la diferencia de espines en la impureza¹, como función de U y μ , para $V = 1$ eV y $\varepsilon_0 = 0,203$ eV. Como se observa, la dependencia de la transición magnética con U es muy similar en ambos sitios de adsorción, en particular para U grande. La diferencia aparece a valores pequeños de U , donde para el sitio *top* vemos que el límite de la transición magnética ocurre para $U \simeq 0,04$ eV, mientras que para el sitio *hollow* ocurre para valores muchos más chicos, alrededor de $U \simeq 10^{-3}$ eV. Es decir, como ya fue observado en la sección anterior, la adsorción en sitio *hollow* favorece la formación de momentos magnéticos para valores más pequeños de U . A grandes valores

¹El patrón tipo *sierra* que se observa en la Fig. 6.6 para el sitio *hollow*, en el límite inferior de la transición magnética, se asocia a la precisión en la integral numérica y solución autoconsistente de la ec. (6.18). Se espera que dichas irregularidades se suavicen al aumentar progresivamente la precisión del cálculo.

6. Momentos magnéticos locales

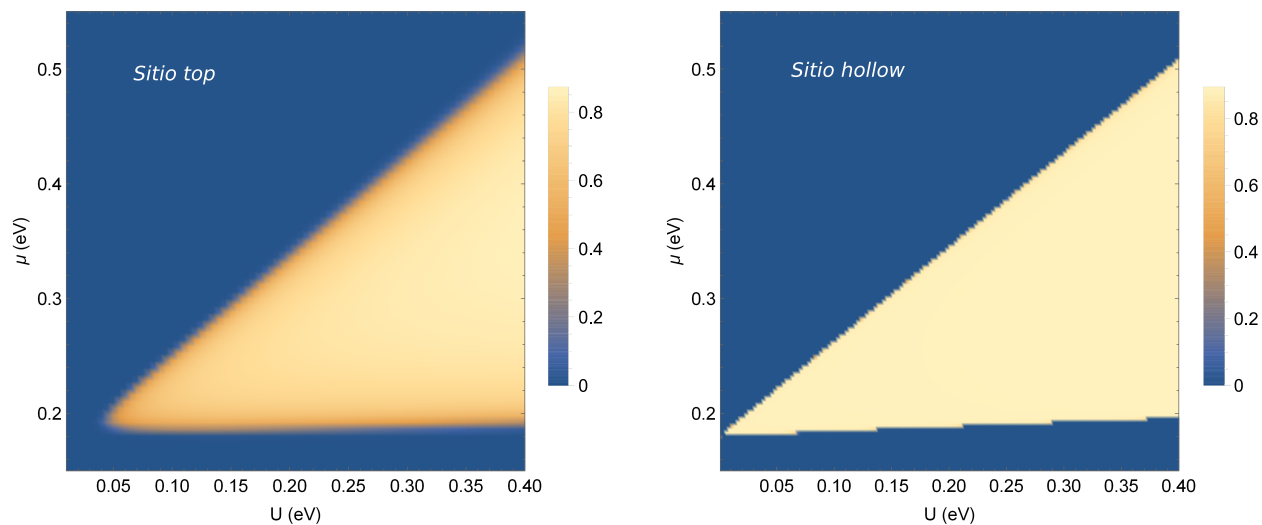


Figura 6.6: Gráfico de densidad para la diferencia de espines en la impureza, como función de U y μ , para $V = 1$ eV y $\varepsilon_0 = 0,203$ eV.

de U , ambos sitios de adsorción presentan momento magnético con una dependencia similar con U y μ . Sin embargo, la magnitud del momento magnético es siempre mayor para el sitio *hollow*, como ya fue observado en la Fig. 6.5.

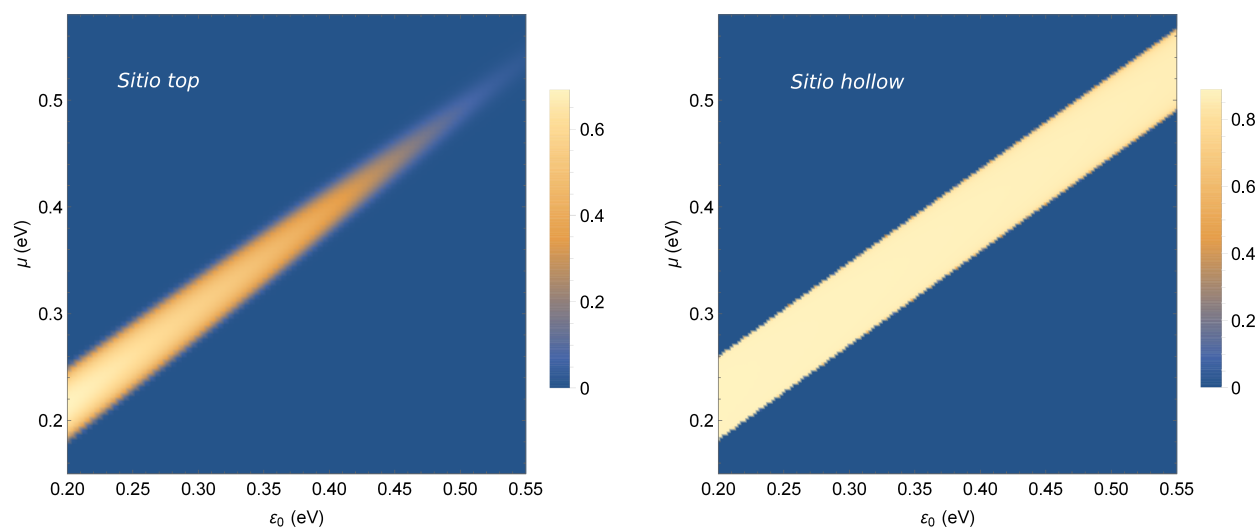


Figura 6.7: Gráfico de densidad para la diferencia de espines en la impureza, como función de ε_0 y μ , para $V = 1$ eV y $U = 0,1$ eV.

En la Fig. 6.7 se muestra el gráfico de densidad para la diferencia de espines en la impureza, como función de ε_0 y μ , para $V = 1$ eV y $U = 0,1$ eV. Los valores de ε_0 considerados son tales que la formación de momento magnético ocurre para valores de μ que satisfacen la aproximación de onda larga en grafeno ($\mu \ll t \sim 3$ eV). Para el sitio *top* se observa que el límite de la transición magnética ocurre para $\varepsilon_0 \simeq 0,5$ eV, donde a su vez $\mu \simeq 0,5$ eV. En cambio, para el sitio *hollow* hay siempre formación de momento magnético para el rango de

6. Momentos magnéticos locales

ε_0 considerado, siendo la curva de transición prácticamente una recta. Se espera entonces que para el sitio *hollow* el límite de la transición magnética suceda para valores de ε_0 mucho más grandes que $\varepsilon_0 \simeq 0,5$ eV, de manera similar a como ocurre al variar V (Fig. 6.5). Notar nuevamente el mismo comportamiento que ya se observó en las figuras anteriores: la magnitud del momento magnético en el sitio *hollow* es siempre mayor que en el sitio *top*.

Las figuras anteriores dan la transición magnética de manera exacta (dentro de los límites de convergencia para las ecuaciones autoconsistentes), lo cual solo puede realizarse de manera numérica. Sin embargo, las curvas de transición magnética pueden estimarse de manera analítica bajo ciertas aproximaciones. Por ejemplo, considerando $V/D \sim 0,1$ tal que las DOS (6.35) y (6.36) pueden aproximarse a primer orden en ξ . Para ello conviene empezar tomando la diferencia entre n_1 y n_2 , lo cual de las ec. (6.18) y (6.22) implica

$$n_2 - n_1 = \int_{-D}^{\mu} \frac{(\text{Im}\Sigma/\pi) [U^2 (n_1^2 - n_2^2) + 2 (Z^{-1}\omega - \varepsilon_0) U (n_2 - n_1)]}{[(Z^{-1}\omega - \varepsilon_0 - Un_2)^2 + (\text{Im}\Sigma)^2] [(Z^{-1}\omega - \varepsilon_0 - Un_1)^2 + (\text{Im}\Sigma)^2]} d\omega. \quad (6.37)$$

Cancelando $(n_1 - n_2)$ en ambos lados, usando las expresiones (6.35) y (6.36), y expandiendo a primer orden en $\xi \equiv \xi_{T/H}/\pi$, resulta

$$1 = U\xi \int_{-D}^{\mu} |\omega|^r \left[\frac{U (n_1 + n_2) - 2 (\omega - \varepsilon_0)}{(\omega - \varepsilon_0 - Un_2)^2 (\omega - \varepsilon_0 - Un_1)^2} \right] d\omega, \quad (6.38)$$

con $r = 1$ y $r = 3$ para sitio *top* y *hollow*, respectivamente. De la última ecuación podemos obtener los bordes de la transición magnética, donde $n_1 = n_2 \equiv n$. Luego

$$1 = -2U\xi \int_{-D}^{\mu} \frac{|\omega|^r}{(\omega - \varepsilon_0 - Un)^3} d\omega. \quad (6.39)$$

Teniendo en cuenta las Fig. 6.2-6.4, los casos límites son $n \sim 0$ y $n \sim 1$. De esta manera se obtienen dos funciones implícitas para μ , las cuales determinan cuándo la magnetización desaparece (i.e. determinan la curva de transición magnética). En particular, para el sitio *top* ($r = 1$), integrando y despejando μ de la ec. (6.39) se obtiene

$$\mu(n) = \frac{(\varepsilon_0 + Un) T_n - \sqrt{T_n U \xi (\varepsilon_0 + Un)^2 (D + \varepsilon_0 + Un)^2}}{T_n - U \xi (D + \varepsilon_0 + Un)^2}, \quad (6.40)$$

donde

$$T_n = (\varepsilon_0 + Un) (D + \varepsilon_0 + Un)^2 - D^2 U \xi. \quad (6.41)$$

Los bordes magnéticos están delimitados por los límites $n = 0, 1$. El resultado se muestra en la Fig. 6.8, donde se graficó μ como función de (a) V (para $U = 0,1$ eV y $\varepsilon_0 = 0,203$ eV), (b) U (para $V = 1$ eV y $\varepsilon_0 = 0,203$ eV), y (c) ε_0 (para $V = 1$ eV y $U = 0,1$ eV). Las

6. Momentos magnéticos locales

dos curvas corresponden a los bordes de la transición magnética, con $n = 0$ (curva inferior) y $n = 1$ (curva superior). El área sombreada indica la región donde se esperaría momento magnético, de acuerdo a la aproximación de la ec. (6.40).

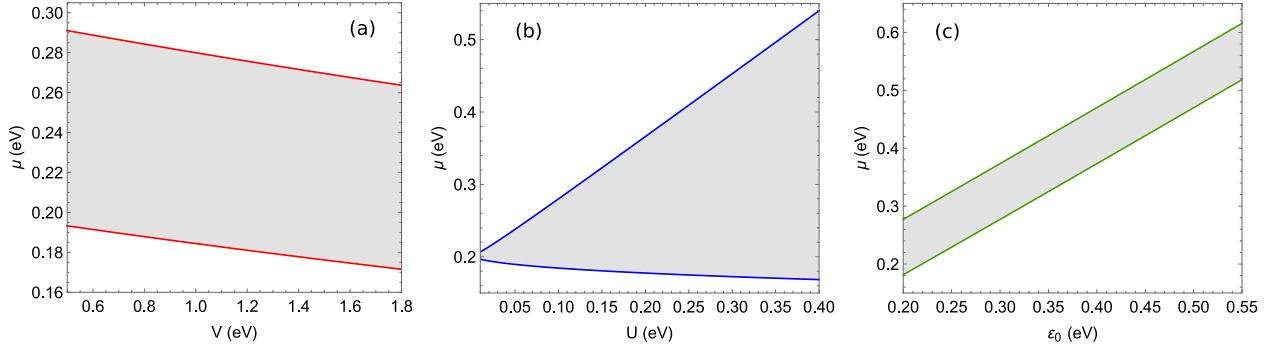


Figura 6.8: Aproximación analítica para los bordes de las regiones magnéticas (sombreado) y no magnéticas, para adsorción en sitio *top*, con μ como función de (a) V (para $U = 0, 1$ eV y $\varepsilon_0 = 0,203$ eV), (b) U (para $V = 1$ eV y $\varepsilon_0 = 0,203$ eV), y (c) ε_0 (para $V = 1$ eV y $U = 0,1$ eV).

Comparando la Fig. 6.8 con las soluciones exactas de las Fig. 6.5-6.7, vemos que la estimación analítica no concuerda con los límites de la transición magnética, lo cual sucede a altos valores de V , U^{-1} y ε_0 . Así, por ejemplo, mientras que según la Fig. 6.5 para el sitio *top*, existe un límite de formación de momento magnético para $V \simeq 1,5$ eV, dicho límite no se observa en la Fig. 6.8(a). Análogamente sucede para los demás casos, variando U o ε_0 . La razón de esta discrepancia reside en la aproximación a primer orden en ξ para obtener la ec. (6.38). Dicha aproximación desprecia el residuo de la autoenergía, así como parte del ensanchamiento de la DOS debido a la parte imaginaria de Σ . Esto conlleva, por ejemplo, a que la DOS diverja cuando $U \rightarrow 0$ y $\omega \rightarrow \varepsilon_0$ [ver ec. (6.39)], lo cual no ocurre al retener el término $\propto \xi^2$ en el denominador de la DOS. A su vez, las curvas de la Fig. 6.8 se obtienen de la ec. (6.40) considerando $n = 0$ y $n = 1$, pero esto no es necesariamente el caso general, donde las transiciones magnéticas pueden ocurrir para $n = n_1 = n_2$ no necesariamente 1 o 0. De hecho, como se observa en las Fig. 6.2-6.4, es de esperar que cuando se alcanza el límite de la transición magnética se tenga $n \sim 0,5$ para el sitio *top*, para lo cual la curva analítica se encontraría entre medio de los límites $n = 0$ y $n = 1$ considerados en la Fig. 6.8.

Aunque la estimación analítica para la transición magnética no es buena aproximación a valores altos de V , U^{-1} y ε_0 , donde se alcanza el límite de la formación de momento magnético, sí representa una buena estimación lejos de dicho límite. En efecto, comparando la Fig. 6.8 con las Fig. 6.5-6.7, se observa que las transiciones magnéticas están aproximadamente en buen acuerdo para $V \lesssim 1$ eV, $\varepsilon_0 \lesssim 0,3$ eV y $U \gtrsim 0,1$ eV. Este resultado es útil ya que los casos de interés son justamente cuando se forma momento magnético en el mayor rango posible de μ . Así, en tal situación la ec. (6.40) provee una simple estimación analítica para

6. Momentos magnéticos locales

los valores del nivel de Fermi donde se esperaría formación de momento magnético. A su vez, según lo visto en las anteriores figuras, a valores relativamente pequeños de V , U^{-1} y ε_0 la formación de momento magnético es similar en ambos sitios de adsorción. Por lo tanto se puede decir que la ec. (6.40) es también una estimación razonable para la transición magnética en el sitio *hollow*.

Capítulo 7

Conclusiones

En el capítulo 4 se realizó una descripción detallada de las oscilaciones magnéticas (OM) en el estado fundamental de los materiales 2D. Se distinguió entre los casos del sistema con una densidad n_e constante, o un potencial químico μ constante. De modo general se desarrolló una formulación matemática para las OM en ambos casos. Se demostró que en los sistemas bidimensionales las OM son siempre discontinuas, y se obtuvieron expresiones analíticas para las amplitudes y fase de las oscilaciones, en función de los niveles de Landau del sistema. En base a esto se argumentó que el perfil de las OM para N constante depende de sus amplitudes, mientras que para μ depende de sus frecuencias. A diferencia de estudios previos, la formulación desarrollada contempla los efectos de campos externos, además del campo magnético perpendicular que da lugar a los niveles de Landau. Esto incluye, por ejemplo, la presencia de un campo eléctrico perpendicular, el cual permite controlar el *band-gap* en los materiales 2D con *buckling*. De esta manera, las expresiones obtenidas permiten relacionar las propiedades de las oscilaciones magnéticas con las de los materiales 2D. En consecuencia, a partir de mediciones precisas de las OM se pueden estimar los parámetros que caracterizan las propiedades electrónicas y magnéticas en los materiales 2D, como por ejemplo la energía de Fermi, la altura de separación entre las subredes, o la interacción espín-órbita.

La naturaleza relativista de los NL en los materiales 2D se evidencia en la dependencia no trivial de las OM con la densidad electrónica. Esto implica que las discontinuidades en la magnetización, asociadas a los cambios en el último nivel ocupado, dependen en general del campo magnético y la densidad electrónica. Tal comportamiento contrasta con lo que ocurre en el típico gas de electrones 2D clásico, donde la relación entre dichas amplitudes es constante. Así, el efecto del desdoblamiento de espín (DE) en las OM de los materiales 2D depende de la densidad electrónica, lo cual en esencia es una consecuencia de la no equidistancia en los NL relativistas. A densidades electrónicas relativamente bajas, el DE es prácticamente despreciable, pero a densidades electrónicas altas su efecto se incrementa,

7. Conclusiones

reflejándose en un aumento en las discontinuidades debido a un cambio de espín en el último nivel ocupado.

En los materiales 2D con *buckling*, como el siliceno o el germaneno, la degeneración de valle se rompe en presencia de un campo eléctrico perpendicular. El resultado son nuevas oscilaciones en la magnetización, asociadas al cambio de valle en el último nivel ocupado. La amplitud de dichas oscilaciones depende no solo de la densidad electrónica y el campo magnético, sino también de la magnitud del campo eléctrico y las propiedades del material. Así, estudiando la dependencia de dichas amplitudes con el campo eléctrico es posible estimar los parámetros que definen al sistema. La presencia de un campo eléctrico también da lugar a un fenómeno de batido en las OM, cuyo perfil depende de la magnitud del campo y las propiedades del material. Se obtuvieron expresiones analíticas que relacionan la envolvente del batido (máximos y mínimos) con los parámetros del sistema. En particular, el ancho del fenómeno de batido, en las OM como función de $1/B$, es $\Delta(1/B) = \hbar v_F^2 / 4\lambda_{SO} l E_z$.

En el capítulo 5 se consideraron los efectos de decaimiento en las OM, debidos a la temperatura o impurezas. Nuevamente se desarrolló una formulación general, asumiendo niveles de Landau 2D con una dependencia arbitraria con los campos externos y el índice de Landau. Los efectos de decaimiento se describieron utilizando un nuevo enfoque respecto del tradicional, el cual se basa en la fórmula de Lifshitz-Kosevich (LK). Dicha fórmula considera los efectos de decaimiento como factores de reducción en la expansión armónica de las OM. En cambio, la nueva descripción desarrollada considera los efectos de decaimiento como una modificación a las OM en el estado fundamental. Específicamente, los efectos de decaimiento son expresados en relación a la ocupación de los niveles de Landau y la amplitud de las discontinuidades de la magnetización en el estado fundamental.

Esta nueva formulación permite, entre otras cosas, realizar una descripción más general del efecto de las impurezas. En particular, permite tener en cuenta la posible dependencia del ensanchamiento con los NL, lo cual no es contemplado en la fórmula LK. Desde el punto de vista práctico, esto podría ser útil para estudiar el mecanismo de *scattering* en materiales 2D en presencia de un campo magnético, analizando cómo se ensanchan los niveles de Landau. En efecto, las mediciones precisas de la magnetización son uno de los métodos más confiables para estudiar los efectos de las impurezas en los NL, puesto que no hay otra perturbación externa al sistema más allá que el campo magnético que causa los niveles.

En el caso de ensanchamiento constante, se comparó el nuevo enfoque y la tradicional fórmula LK, demostrando que dependiendo de la situación, uno u otro enfoque puede resultar más efectivo. Así, a bajo decaimiento las OM dependen solo del factor de ocupación de los NL más cercanos a la energía de Fermi, mientras que a mayor decaimiento se necesita considerar la ocupación de niveles más lejanos. En contraste, a bajo decaimiento se necesitan muchos armónicos para que la serie de la fórmula LK converja; a alto decaimiento solo se necesitan

7. Conclusiones

los primeros armónicos. De esta manera, en términos generales se puede decir que la nueva descripción es más efectiva para estudiar la reducción de los detalles finos en las OM a bajo decaimiento, por ejemplo al ir incrementando la temperatura. En cambio, a mayor decaimiento las OM se vuelven armónicas simples y la fórmula LK resulta más conveniente.

Bajo estas consideraciones, con la nueva descripción se estudiaron la reducción y eventual *desaparición* de los detalles finos en las OM, debido a los efectos del desdoblamiento de espín o el mezclado de valle (MV). En particular, se obtuvo una estimación de las mínimas temperaturas necesarias para observar estos efectos en las OM. Para el efecto de DE, la temperatura debe ser tal que $T < 2\mu_B B/5k_B$, mientras que para los efectos de MV, la temperatura debe ser $T < \hbar v_F^2 e B/5\mu k_B$. También se estudió cómo la temperatura provoca un desplazamiento δ de los extremos de las OM, respecto de su ubicación en el estado fundamental. Dicho desplazamiento depende en general del campo magnético, aunque la dependencia es relativamente pequeña, mucho menor que el periodo de las oscilaciones. De todos modos, a temperaturas suficientemente altas tales que $T > \hbar v_F^2 e B/5\mu k_B$, el desplazamiento de los extremos tiende a un valor límite $\delta \rightarrow 1/4\omega$, independientemente del campo magnético. Este límite se ubica entre las discontinuidades de las OM en el estado fundamental y los ceros de las OM. A temperaturas para las cuales $\delta = 1/4\omega$, la mayoría de los detalles finos en las OM se pierden. En consecuencia las oscilaciones son prácticamente armónicas, como sucede en la mayoría de los metales 3D, y por lo tanto conviene describirlas utilizando la fórmula LK.

En el Capítulo 6 se estudiaron la formación de momentos magnéticos sobre una impureza adsorbida en sitios *top* y *hollow* de la red de grafeno. Utilizando el modelo de impurezas de Anderson, considerando la correlación electrónica en la impureza y la hibridización de ésta con la red, se examinaron las condiciones en las cuales hay magnetismo en la impureza. Esto depende del nivel de Fermi, la energía en la impureza, la energía de hibridización y la magnitud de la correlación electrónica. Se encontró que debido al ensanchamiento anómalo de la densidad de estados de la impureza al hibridizarse con la red, la formación de momentos magnéticos es más sencilla en grafeno que en un metal ordinario. La facilidad en la formación de momentos magnéticos depende del sitio de adsorción, lo cual puede entenderse debido a la diferente hibridización en cada caso. Esto conlleva a que la formación de momentos magnéticos en un sitio *hollow* ocurra para valores de U^{-1} , V y ε_0 más grandes que los necesarios para el sitio *top*. Por otra parte, se obtuvieron curvas teóricas para la transición magnetismo-no magnetismo en la impureza, en función de los parámetros μ , V , U y ε_0 , indicando un amplio rango de posibles de valores μ en los cuales puede haber formación de momentos magnéticos. Esto puede ser útil en campos como la espintrónica, puesto que nos dice que los momentos magnéticos pueden manipularse por medio del voltaje que controla el nivel de Fermi.

7. Conclusiones

Como conclusiones generales puede decirse que los materiales 2D poseen propiedades magnéticas únicas, no presentes en metales convencionales. Las oscilaciones magnéticas reflejan estas propiedades en su amplitud y frecuencia. Esto puede ser útil para entender, estimar y predecir las propiedades intrínsecas de los materiales, tales como su estructura geométrica, velocidad de Fermi, acoplamiento espín-órbita o desdoblamiento de espín. En este sentido, los resultados obtenidos en esta tesis proveen el marco teórico a partir del cual se pueden guiar y predecir resultados experimentales. Por otra parte, la formación de momentos magnéticos en una impureza adsorbida en grafeno puede depender significativamente del sitio de adsorción, lo cual también refleja las propiedades del material. En comparación con un metal ordinario, la naturaleza bidimensional del sistema permite un mayor rango de manipulación de los momentos magnéticos.

Los cálculos teóricos desarrollados sirven no solo para entender las propiedades de los materiales 2D estudiados, como grafeno o siliceno, sino también como base para el estudio de otros sistemas bidimensionales. La formulación general de las oscilaciones magnéticas es aplicable a cualquier material 2D, contemplando cualquier distribución de impurezas, más allá de lo analizado en esta tesis. A su vez, el modelo de Anderson aplicado a grafeno se puede extender de manera directa a otros materiales 2D como siliceno, en presencia de un campo eléctrico perpendicular. Por lo tanto se espera que los resultados de esta tesis sirvan de guía para seguir estudiando las propiedades magnéticas de materiales 2D, no solo para entender teóricamente los sistemas, sino también para el desarrollo y comprensión de futuros experimentos.

Apéndices para el Capítulo 5

A. Aproximación de las OM para $\beta\mu, \mu/\Gamma \gg 1$

Mostraremos que a bajo decaimiento, tal que $\beta\mu \gg 1$ y $\mu/\Gamma \gg 1$, podemos despreciar los términos con $I_{1,r}$ y $I_{3,r}$ en la parte oscilatoria de la ec. (5.9). Empezamos con la separación de los términos para $r \leq f$ y $r \geq f+1$, como se realizó en la ec. (5.9). Definimos $I_{i,>} = \sum_{m=f+1}^{\infty} I_{i,m}$ para $i = \{1, 2, 3\}$, y

$$I_{1,<} = \sum_{r=1}^f \left[I_{1,r} - \frac{D}{B} (r - \mu) \right] \quad (\text{A.1})$$

$$I_{2,<} = \sum_{r=1}^f \left[I_{2,r} - D \frac{\partial \varepsilon_r}{\partial B} \right] \quad (\text{A.2})$$

$$I_{3,<} = \sum_{r=1}^f I_{3,r}. \quad (\text{A.3})$$

La idea es entonces demostrar que, a bajo decaimiento, las amplitudes de las oscilaciones de I_1 y I_3 son mucho menores que la amplitud de las oscilaciones de I_2 . En cada caso, la amplitud se determina cuando $f = \text{floor}[\psi]$ cambia (de aquí en más obviaremos, para simplificar, el índice γ), lo cual ocurre cuando los niveles de energía ε_r cruzan el potencial químico μ . Suponer que f cambia a $f+1$ para un dado campo $B = B_f$, tal que $\varepsilon_{f+1}(B_f) = \mu$. Luego

$$\Delta I_{1,<} = I_{1,f+1} = -\Delta I_{1,>} \quad (\text{A.4})$$

$$\Delta I_{2,<} = I_{2,f+1} - D \frac{\partial \varepsilon_{f+1}}{\partial B}, \quad \Delta I_{2,>} = -I_{2,f+1} \quad (\text{A.5})$$

$$\Delta I_{3,<} = I_{3,f+1} = -\Delta I_{3,>}, \quad (\text{A.6})$$

donde, definiendo $y = (\varepsilon - \varepsilon_{f+1}) = (\varepsilon - \mu)$, de las ec. (5.6)-(5.8) podemos escribir

$$I_{1,f+1} = -\frac{D}{B} k_B T \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{f+1} \ln(1 + e^{\beta y}) dy \quad (\text{A.7})$$

$$I_{2,f+1} = D \frac{\partial \varepsilon_{f+1}}{\partial B} \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{f+1} \frac{1}{1 + e^{\beta y}} dy \quad (\text{A.8})$$

$$I_{3,f+1} = -\frac{D}{\beta} \frac{\partial \Gamma_{f+1}}{\partial B} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \rho_{f+1}}{\partial \Gamma} \ln(1 + e^{\beta x}) dy. \quad (\text{A.9})$$

Ahora bien, puesto que $\int_{-\infty}^{\infty} \rho_{f+1} dy = 1$, se tiene

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho_{f+1} dy = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{f+1} \left(\frac{1}{1 + e^{\beta y}} + \frac{1}{1 + e^{-\beta y}} \right) dy = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{f+1} \frac{1}{1 + e^{\beta y}} dx = 1. \quad (\text{A.10})$$

Por lo tanto $I_{2,f+1} = D (\partial \varepsilon_{f+1} / \partial B) / 2$, donde $(\partial \varepsilon_{f+1} / \partial B) \sim \mu / B$. Así, de la ec. (A.8) obtenemos

$$|\Delta I_{2,<}| = |\Delta I_{2,>}| \equiv |\Delta I_2| \sim D \frac{\mu}{B}, \quad (\text{A.11})$$

independientemente de los parámetros de decaimiento T y Γ . La amplitud $|\Delta I_2|$ tiene el mismo orden de magnitud que la amplitud de las OM en el estado fundamental [ver. ec. (4.21)], lo cual explica por qué las OM con decaimiento se reducen a cero cuando los niveles de energía cruzan μ (ver Fig. 5.2).

Por otro lado, para I_1 y I_3 , el orden de magnitud de su amplitud de oscilación depende de los parámetros de decaimiento T y Γ . Esto puede verse por inspección de las ec. (A.7) y (A.9), cuyos valores dependen de T y Γ . Por ejemplo, en el caso prístino (i.e. sin impurezas) tal que $\rho(y) \rightarrow \delta(y)$, se tiene $|I_{1,f+1}| \sim D k_B T / B$ y $I_{3,f+1} = 0$ ($\partial \Gamma / \partial B = 0$ sin impurezas). Análogamente, a temperatura nula se tiene $|I_{1,f+1}| \sim D \Gamma / B$ y también $|I_{3,f+1}| \sim D \Gamma / B$. En el caso general, con temperatura e impurezas, podemos decir que $|I_{1,f+1}| \sim D \{\Gamma\}_1 / B$ y $|I_{3,f+1}| \sim D \{\Gamma\}_3 / B$, donde $\{\Gamma\}_1$ y $\{\Gamma\}_3$ son términos que dependen de los parámetros de decaimiento $k_B T$ y Γ . No nos interesa aquí como son estos términos (lo cual dependería de cómo es la distribución de impurezas ρ), sino más bien el hecho de que $\{\Gamma\}_1$ y $\{\Gamma\}_3$ siempre aumentan si Γ y T se incrementan. Luego, de las ec. (A.4) y (A.6) podemos decir que

$$|\Delta I_{1,<}| = |\Delta I_{1,>}| \equiv |\Delta I_1| \sim D \frac{\{\Gamma\}_1}{B} \quad (\text{A.12})$$

$$|\Delta I_{3,<}| = |\Delta I_{3,>}| \equiv |\Delta I_3| \sim D \frac{\{\Gamma\}_3}{B}. \quad (\text{A.13})$$

De las ec. (A.11), (A.12) y (A.13) se obtienen entonces las relaciones

$$\left| \frac{\Delta I_1}{\Delta I_2} \right| \sim \frac{\{\Gamma\}_1}{\mu} \quad (\text{A.14})$$

$$\left| \frac{\Delta I_3}{\Delta I_2} \right| \sim \frac{\{\Gamma\}_3}{\mu}. \quad (\text{A.15})$$

Por lo tanto, en la condición de bajo decaimiento $\{\Gamma\}/\mu \ll 1$, tenemos $|\Delta I_1/\Delta I_2| \ll 1$ y $|\Delta I_3/\Delta I_2| \ll 1$, de forma que los términos $I_{1,r}$ y $I_{3,r}$ pueden despreciarse en la parte oscilatoria de la ec. (5.9).

B. Parte oscilatoria de los efectos de decaimiento

La idea es mostrar que, bajo la condición $\beta\mu \gg 1$ y $\mu/\Gamma \gg 1$, los dos últimos términos en la ec. (5.12) son una función oscilatoria. En general, el factor de ocupación \mathcal{F}_n (por simplicidad obviaremos escribir explícitamente el índice γ), dado por la ec. (5.10), depende de n a través de ε_n y Γ_n (en caso de que el ensanchamiento dependa de los NL). También depende de ψ como una función sigmoide. Es decir, para todo n , \mathcal{F}_n satisface $\mathcal{F}_n(\psi = n) = 1/2$, con $\mathcal{F}_n(\psi \rightarrow 0) = 0$ y $\mathcal{F}_n(\psi \rightarrow \infty) = 1$. Teniendo en cuenta esto, partimos considerando que en la condición de bajo decaimiento, cada factor de ocupación \mathcal{F}_n varía con la temperatura solo para ε_n cercano a μ . Esto implica que, de manera similar a como se consideró $D(\partial\varepsilon_n/\partial B) \rightarrow -\mathcal{A}\mathcal{A}$ en la ec. (5.11), podemos expandir cada ε_n en n alrededor de $\psi = n$. A su vez, en caso de que el parámetro de decaimiento Γ_n dependa de n , a bajo decaimiento podemos considerar $n = \psi$. De esta manera definimos

$$\varepsilon_n \rightarrow \tilde{\varepsilon}_n \equiv \mu + \left. \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial n} \right|_{n=\psi} (n - \psi) \quad (\text{B.1})$$

$$\Gamma_n \rightarrow \tilde{\Gamma}_n \equiv \Gamma_{n=\psi}. \quad (\text{B.2})$$

Con estas expansiones, definimos los efectos de decaimiento en la ec. (5.12) como $\tilde{M} = M_1 + M_2$, donde

$$M_1 = A \sum_{n=1}^{2f} \left(\tilde{\mathcal{F}}_n - 1/2 \right) \quad (\text{B.3})$$

$$M_2 = A \sum_{n=2f+1}^{\infty} \tilde{\mathcal{F}}_n, \quad (\text{B.4})$$

Apéndices para el Capítulo 5

siendo $f = \text{floor}[\psi]$ y

$$\tilde{\mathcal{F}}_n(\psi) \equiv \mathcal{F}_n[\varepsilon_n = \tilde{\varepsilon}_n, \Gamma_n = \tilde{\Gamma}_n]. \quad (\text{B.5})$$

De aquí, probaremos que M_1 y M_2 son funciones oscilatorias. Para M_1 , considerar $\varepsilon_f \leq \mu < \varepsilon_{f+1}$ tal que $f < \psi < f + 1$. En $\psi = f$, la suma de $\tilde{\mathcal{F}}_n(\psi)$ en M_1 es

$$\sum_{n=1}^{2f} \tilde{\mathcal{F}}_n(f) = \tilde{\mathcal{F}}_f(f) + \tilde{\mathcal{F}}_{2f}(f) + \sum_{r=1}^{f-1} [\tilde{\mathcal{F}}_r(f) + \tilde{\mathcal{F}}_{2f-r}(f)]. \quad (\text{B.6})$$

El grupo de términos $[\tilde{\mathcal{F}}_r(f) + \tilde{\mathcal{F}}_{2f-r}(f)]$, con $1 \leq r \leq f - 1$, son de la forma

$$[\tilde{\mathcal{F}}_r(f) + \tilde{\mathcal{F}}_{2f-r}(f)] = \int_{-\infty}^{\infty} [\tilde{\rho}_r(f) + \tilde{\rho}_{2f-r}(f)] \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu)}} d\varepsilon, \quad (\text{B.7})$$

donde definimos $\tilde{\rho}_n(f) \equiv \rho[\varepsilon, \varepsilon_n = \tilde{\varepsilon}_n, \Gamma_n = \tilde{\Gamma}_n]$. Para un dado ψ , el parámetro $\tilde{\Gamma}_n = \Gamma_{n=\psi}$ es el mismo para todos los n , por lo cual lo omitiremos explícitamente. Asumiendo una DOS simétrica, ρ depende con ε y ε_n a través de un factor $|\varepsilon - \varepsilon_n|$. Luego, si $\chi \equiv \partial\varepsilon_n/\partial n|_{n=\psi}$ (independiente de n), de la ec. (B.1) obtenemos

$$\tilde{\rho}_r(f) = \rho[\varepsilon - \mu - \chi(r - f)] \quad (\text{B.8})$$

$$\tilde{\rho}_{2f-r}(f) = \rho[\varepsilon - \mu + \chi(r - f)]. \quad (\text{B.9})$$

Reemplazando en la ec. (B.7) y cambiando variables resulta

$$[\tilde{\mathcal{F}}_r(f) + \tilde{\mathcal{F}}_{2f-r}(f)] = \int_{-\infty}^{\infty} \rho[y + \chi(f - r)] \frac{1}{1 + e^{\beta y}} dy + \int \rho[-y - \chi(f - r)] \frac{1}{1 + e^{-\beta y}} dy. \quad (\text{B.10})$$

Puesto que la DOS ρ es simétrica, tenemos $\rho[y + \chi(f - r)] = \rho[-y - \chi(f - r)]$. Por lo tanto

$$\begin{aligned} [\tilde{\mathcal{F}}_r(f) + \tilde{\mathcal{F}}_{2f-r}(f)] &= \int_{-\infty}^{\infty} \rho[y + \chi(f - r)] \left(\frac{1}{1 + e^{\beta y}} + \frac{1}{1 + e^{-\beta y}} \right) dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \rho[y + \chi(f - r)] dy = 1. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

De esta manera, como $\tilde{\mathcal{F}}_f(f) = \mathcal{F}_n(\varepsilon_n = \mu) = 1/2$ (independientemente de n y f ; ver ec. (5.10)), la ec. (B.6) queda

$$\sum_{n=1}^{2f} \tilde{\mathcal{F}}_n(f) = 1/2 + \tilde{\mathcal{F}}_{2f}(f) + (f+1). \quad (\text{B.12})$$

A bajo decaimiento y alta ocupación (tal que $f \gg 1$), tenemos $\tilde{\mathcal{F}}_{2f}(f) \ll 1$. Luego de la ec. (B.3) obtenemos

$$M_1(\psi = f) \simeq -\frac{A}{2}. \quad (\text{B.13})$$

Siguiendo los mismos pasos, para la misma posición final f , cuando $\psi \rightarrow f+1$ (teniendo desde el lado *izquierdo*, tal que la posición final sigue siendo $[\psi] = f$) se obtiene $M_1(\psi \rightarrow f+1) \simeq A/2$. Puesto que esto es válido para todo f , luego M_1 siempre oscila entre $\pm A/2$ al considerar la expansión a primer orden en ε_n y Γ_n .

Por otra parte, de la ec. (B.4) se ve que M_2 también oscila cuando f cambia. Sin embargo, en este caso no es suficiente con reemplazar la expansión a primer orden de ε_n y Γ_n en \mathcal{F}_n , para obtener la parte oscilatoria de M_2 . La razón es que en la sumatoria de M_2 , $n > 2f$ siempre, por lo que para $f < \psi < f+1$, uno no puede ordenar los términos como en la ec. (B.11). La principal contribución oscilatoria en M_2 proviene de su discontinuidad siempre que f cambia. De la ec. (B.4), cuando f varía a $f+1$, en $\psi = f+1$ tenemos

$$\Delta M_2 = -A \left[\tilde{\mathcal{F}}_{2f+2}(f+1) + \tilde{\mathcal{F}}_{2f+1}(f+1) \right]. \quad (\text{B.14})$$

Por lo tanto la parte oscilatoria de M_2 es una SO, con amplitud ΔM_2 que depende de f . De todos modos, a bajo decaimiento y alta ocupación f , se tiene $\mathcal{F}_n \ll 1$ si $n \geq 2f$, por lo que la SO de M_2 puede ignorarse. Así, bajo esta condición es buena aproximación desprestigiar la contribución de M_2 , tal que $\tilde{M} \simeq M_1$. Como ya demostramos que M_1 es una función oscilatoria, entonces se concluye que los efectos de decaimiento en la ec. (5.12) son efectivamente una función oscilatoria.

C. Equivalencia entre las ec. (5.12) y (5.13)

Mostraremos que la ec. (5.13), con el factor de ocupación $\mathcal{F}_{n;\gamma}$ dentro de la función cotangente, es equivalente a la ec. (5.12). Primero que nada, recordar las propiedades para

todo $x \in \mathbb{R}$

$$\cot x = \tan(\pi/2 - x) \quad (\text{C.1})$$

$$\arctan[\tan(x)] = x + \pi \text{floor}\left[\frac{x + \pi/2}{\pi}\right]. \quad (\text{C.2})$$

Así, para todo índice γ podemos escribir la ec. (5.13) como

$$\frac{M_{osc,\gamma}}{A_\gamma} = \frac{1}{2} - \psi_\gamma + \sum_n \mathcal{F}_{n;\gamma} + \text{floor}\left[1 - \psi_\gamma + \sum_n \mathcal{F}_{n;\gamma}\right]. \quad (\text{C.3})$$

Ahora bien, teniendo en cuenta la expresión general (5.10) para $\mathcal{F}_{n;\gamma}$, considerando $f_\gamma \leq \psi_\gamma < f_\gamma + 1$, donde f_γ es último nivel ocupado en el estado fundamental tal que $f_\gamma = \text{floor}[\psi_\gamma]$, siempre se tiene

$$\mathcal{F}_{n;\gamma} = \begin{cases} \geq 1/2 & n \leq f_\gamma \\ \leq 1/2 & n \geq f_\gamma + 1 \end{cases}. \quad (\text{C.4})$$

A su vez, a bajo decaimiento se tiene $\mathcal{F}_{n;\gamma} \rightarrow 1$ si $n < f_\gamma$, mientras que $\mathcal{F}_{n;\gamma} \ll 1$ si $n > f_\gamma + 1$. Estas consideraciones, junto con las propiedades de la función floor, implican que, para $f_\gamma \leq \psi_\gamma < f_\gamma + 1$, la ec. (C.3) puede escribirse como

$$\begin{aligned} \frac{M_{osc,\gamma}}{A_\gamma} &= \frac{1}{2} - \psi_\gamma + \sum_n \mathcal{F}_{n;\gamma} + \text{floor}[1 - \psi_\gamma] - \sum_{n \leq f_\gamma} 1 \\ &= \frac{1}{2} - \psi_\gamma + \text{floor}[1 - \psi_\gamma] + \sum_{n \leq f_\gamma} (\mathcal{F}_{n;\gamma} - 1) + \sum_{n > f_\gamma} \mathcal{F}_{n;\gamma}. \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

Finalmente, de las propiedades (C.1) y (C.2) es fácil ver que $\arctan[\cot(\pi\psi_\gamma)]/\pi = 1/2 - \psi_\gamma + \text{floor}[1 - \psi_\gamma]$. Por lo tanto la ec. (C.5) queda

$$\frac{M_{osc,\gamma}}{A_\gamma} = \frac{1}{\pi} \arctan[\cot(\pi\psi_\gamma)] + \sum_{n \leq f_\gamma} (\mathcal{F}_{n;\gamma} - 1) + \sum_{n > f_\gamma} \mathcal{F}_{n;\gamma}, \quad (\text{C.6})$$

que no es otra cosa que la ec. (5.12), siendo $M_{osc,\gamma}^0 = A_\gamma \arctan[\cot(\pi\psi_\gamma)]/\pi$ las OM en el estado fundamental, válido para $\psi_\gamma \gg 1$ [ec. (4.27)].

D. Efectos de decaimiento como factores de reducción

Aquí obtendremos, de la ec. (5.19), las OM con los efectos de decaimiento como factores de reducción. Partimos de considerar las SO para $M_\gamma^0(\varepsilon)$, dadas por la ec. (4.22). Se tiene

$$M_\gamma^0(\varepsilon) = A_\gamma(\varepsilon) \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi p} \text{sen}[2\pi p \psi_\gamma(\varepsilon)], \quad (\text{D.1})$$

donde explícitamente indicamos que A_γ y ψ_γ se obtienen considerando un potencial químico igual a ε . Reemplazando en la ec. (5.19) resulta

$$M_\gamma(\mu) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[-\frac{\partial n_F}{\partial \varepsilon'}(\varepsilon' - \mu) \right] Y_\gamma(\varepsilon') d\varepsilon', \quad (\text{D.2})$$

donde

$$\begin{aligned} Y_\gamma(\varepsilon') &= \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\varepsilon' - \varepsilon) A_\gamma(\varepsilon) \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi p} \text{sen}[2\pi p \psi_\gamma(\varepsilon)] d\varepsilon \\ &= \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi p} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) A_\gamma(\varepsilon' - x) \text{sen}[2\pi p \psi_\gamma(\varepsilon' - x)] dx. \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

A bajo decaimiento, la DOS $\rho(x)$ es no nula solo para $|x| \ll 1$, por lo que es buena aproximación tomar $A_\gamma(\varepsilon' - x) \simeq A_\gamma(\varepsilon')$ afuera de la integral. También podemos tomar $\psi_\gamma(\varepsilon' - x) - \psi_\gamma(\varepsilon') \simeq (\partial\psi_\gamma/\partial\varepsilon')x$, de forma que la función seno puede descomponerse como

$$\begin{aligned} \text{sen}[2\pi p \psi_\gamma(\varepsilon' - x)] &= \text{sen}[2\pi p \psi_\gamma(\varepsilon')] \cos\left(2\pi p \frac{\partial\psi_\gamma}{\partial\varepsilon'} x\right) \\ &\quad + \cos[2\pi p \psi_\gamma(\varepsilon')] \text{sen}\left(2\pi p \frac{\partial\psi_\gamma}{\partial\varepsilon'} x\right). \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

Luego, dado que $\rho_\gamma(x)$ es una función simétrica (como se asumió), se obtiene

$$Y_\gamma(\varepsilon') = A_\gamma(\varepsilon') \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi p} \text{sen}[2\pi p \psi_\gamma(\varepsilon')] \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) \cos\left(2\pi p \frac{\partial\psi_\gamma}{\partial\varepsilon'} x\right) dx. \quad (\text{D.5})$$

De aquí podemos identificar el factor de reducción de impurezas R_Γ , dado por la integral en la última ecuación. Esto es,

$$R_{\Gamma,\gamma}(p, \varepsilon') = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) \cos\left(2\pi p \frac{\partial\psi_\gamma}{\partial\varepsilon'} x\right) dx. \quad (\text{D.6})$$

Reemplazando en la ec. (D.2) y cambiando variables se tiene

$$M_\gamma(\mu) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[-\frac{\partial n_F}{\partial x}(x)\right] A_\gamma(x + \mu) \sum_{p=1}^{\infty} \frac{R_{\Gamma,\gamma}(p, x + \mu)}{\pi p} \text{sen}[2\pi p \psi_\gamma(x + \mu)] dx. \quad (\text{D.7})$$

A bajas temperaturas, la función $(\partial n_F/\partial x)$ es no nula solo para $|x| \ll 1$, por lo que podemos tomar $A_\gamma(x + \mu) \simeq A_\gamma(\mu)$ y $R_{\Gamma,\gamma}(p, x + \mu) \simeq R_{\Gamma,\gamma}(p, \mu)$ afuera de la integral. Luego, descomponiendo de nuevo la función seno como en la ec. (D.4), y considerando que $(\partial n_F/\partial x)$ es una función simétrica, la ec. (D.7) queda

$$M_\gamma(\mu) = A_\gamma(\mu) \sum_{p=1}^{\infty} \frac{R_{\Gamma,\gamma}(p, \mu)}{\pi p} \text{sen}[2\pi p \psi_\gamma(\mu)] \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\partial n_F}{\partial x}\right) \cos\left(2\pi p \frac{\partial\psi_\gamma}{\partial\mu} x\right) dx. \quad (\text{D.8})$$

Así, podemos identificar el factor de reducción de la temperatura R_T , dado por

$$R_{T,\gamma}(p, \mu) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\partial n_F}{\partial x}\right) \cos\left(2\pi p \frac{\partial\psi_\gamma}{\partial\mu} x\right) dx. \quad (\text{D.9})$$

Finalmente se obtiene

$$M_{osc,\gamma} = A_\gamma \sum_{p=1}^{\infty} R_{\Gamma,\gamma}(p, \mu) R_{T,\gamma}(p, \mu) \frac{\text{sen}[2\pi p \psi_\gamma(\mu)]}{\pi p}. \quad (\text{D.10})$$

De esta manera, los efectos de decaimiento de la temperatura e impurezas se describen como factores de reducción.

E. Ejemplos de efectos de decaimiento

Aquí obtendremos los efectos de decaimiento en las OM, según el formalismo de las secciones 5.1.2 y 5.1.3, para algunos casos especiales. No particularizamos para un dado sistema, de manera que los resultados corresponden a cualquier material 2D con niveles de energía $\varepsilon_{n;\gamma}$. En cada situación obtenemos el factor de ocupación $\mathcal{F}_{n;\gamma}$ y el factor de

reducción $R_{\Gamma,\gamma}(p)$, dados por las ec. (5.10) y (5.22), respectivamente. El factor de reducción de la temperatura $R_{T,\gamma}(p)$ tiene siempre la misma expresión general (5.23).

E.1. El caso prístino

Sin impurezas, la DOS es simplemente la delta de Dirac $\rho_{n;\gamma} = \delta(\varepsilon - \varepsilon_{n;\gamma})$. Luego el factor de ocupación resulta

$$\mathcal{F}_{n;\gamma} = \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon_{n;\gamma} - \mu)}}, \quad (\text{E.1})$$

que no es otra cosa que la distribución de Fermi-Dirac para el nivel de energía $\varepsilon_{n;\gamma}$. Para los factores de reducción, si $\Gamma = 0$ se tiene $R_{\Gamma,\gamma}(p) = 1$, mientras que el factor de reducción de la temperatura está dado por la ec. (5.23).

E.2. Impurezas a temperatura nula

A temperatura nula, $\beta \rightarrow \infty$ y la ec. (5.10) queda

$$\mathcal{F}_{n;\gamma} = \int_{-\infty}^{\mu} \rho_{n;\gamma} d\varepsilon. \quad (\text{E.2})$$

Para seguir uno debería especificar cómo es el ensanchamiento de los niveles, esto es, cómo es $\rho_{n;\gamma}$. Algunos casos usuales son las distribuciones de Lorentz (L), Gauss (G) y semi-elíptica (E), las cuales tienen la forma

$$\text{(L)} \quad \rho_{n;\gamma} = \frac{\Gamma_{n;\gamma}}{\pi [(\varepsilon - \varepsilon_{n;\gamma})^2 + \Gamma_{n;\gamma}^2]} \quad (\text{E.3})$$

$$\text{(G)} \quad \rho_{n;\gamma} = \frac{1}{\Gamma_{n;\gamma} \sqrt{\pi}} e^{-(\varepsilon - \varepsilon_{n;\gamma})^2 / \Gamma_{n;\gamma}^2}, \quad (\text{E.4})$$

$$\text{(E)} \quad \rho_{n;\gamma} = \frac{2}{\pi \Gamma_{n;\gamma}^2} \text{Re} \left[\sqrt{\Gamma_{n;\gamma}^2 - (\varepsilon - \varepsilon_{n;\gamma})^2} \right], \quad (\text{E.5})$$

donde $\Gamma_{n;\gamma}$ es el parámetro de ensanchamiento, el cual puede en general depender del nivel de Landau y otras variables tales como el campo magnético B . Luego, de la ec. (E.2) se obtiene

$$\text{(L)} \quad \mathcal{F}_{n;\gamma} = \frac{1}{\pi} \left[\arctan \left(\frac{\mu - \varepsilon_{n;\gamma}}{\Gamma_{n;\gamma}} \right) + \frac{\pi}{2} \right] \quad (\text{E.6})$$

$$\text{(G)} \quad \mathcal{F}_{n;\gamma} = \frac{1}{2} \left[\text{erf} \left(\frac{\mu - \varepsilon_{n;\gamma}}{\Gamma_{n;\gamma}} \right) + 1 \right] \quad (\text{E.7})$$

$$(E) \quad \mathcal{F}_{n;\gamma} = \frac{1}{\pi} \left[\arctan \left(\frac{\mu - \varepsilon_{n;\gamma}}{\operatorname{Re} \left[\sqrt{\Gamma_{n;\gamma}^2 - (\mu - \varepsilon_{n;\gamma})^2} \right]} \right) + \frac{\pi}{2} \right] + \frac{(\mu - \varepsilon_{n;\gamma})}{\pi \Gamma_{n;\gamma}^2} \operatorname{Re} \left[\sqrt{\Gamma_{n;\gamma}^2 - (\mu - \varepsilon_{n;\gamma})^2} \right]. \quad (E.8)$$

Para los factores de reducción, a temperatura nula $R_{T,\gamma}(p) = 1$, mientras que para $R_{\Gamma,\gamma}(p)$ se debe considerar que el ensanchamiento es el mismo para todos los NL, de forma que $\Gamma_{n;\gamma} = \Gamma_\gamma$. Así, de la ec. (5.22) se obtiene

$$(L) \quad R_{\Gamma,\gamma}(p) = \exp \left(-2\pi p \Gamma_\gamma \frac{\partial \psi_\gamma}{\partial \mu} \right) \quad (E.9)$$

$$(G) \quad R_{\Gamma,\gamma}(p) = \exp \left[- \left(\pi p \Gamma_\gamma \frac{\partial \psi_\gamma}{\partial \mu} \right)^2 \right] \quad (E.10)$$

$$(E) \quad R_{\Gamma,\gamma}(p) = \frac{1}{\pi p \Gamma_\gamma (\partial \psi_\gamma / \partial \mu)} J_1 \left(2\pi p \Gamma_\gamma \frac{\partial \psi_\gamma}{\partial \mu} \right), \quad (E.11)$$

donde J_1 es la función de Bessel de primera especie.

Bibliografía

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, & A. A. Firsov. *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*. Science, vol. 306(5696):666–669 (2004). [2](#), [3](#), [39](#)
- [2] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, & A. A. Firsov. *Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene*. Nature, vol. 438(7065):197–200 (2005). [39](#)
- [3] A. K. Geim & K. S. Novoselov. *The rise of graphene*. Nature Materials, vol. 6(3):183–191 (2007). [3](#), [18](#), [39](#), [40](#)
- [4] S. Stankovich, D. A. Dikin, G. H. B. Dommett, K. M. Kohlhaas, E. J. Zimney, E. A. Stach, R. D. Piner, S. T. Nguyen, & R. S. Ruoff. *Graphene-based composite materials*. Nature, vol. 442(7100):282–286 (2006). [2](#)
- [5] K. S. Novoselov, V. I. Fal'ko, L. Colombo, P. R. Gellert, M. G. Schwab, & K. Kim. *A roadmap for graphene*. Nature, vol. 490(7419):192–200 (2012). [2](#)
- [6] G. R. Bhimanapati, Z. Lin, V. Meunier, Y. Jung, J. Cha, S. Das, D. Xiao, Y. Son, M. S. Strano, V. R. Cooper, L. Liang, S. G. Louie, E. Ringe, W. Zhou, S. S. Kim, R. R. Naik, B. G. Sumpter, H. Terrones, F. Xia, Y. Wang, J. Zhu, D. Akinwande, N. Alem, J. A. Schuller, R. E. Schaak, M. Terrones, & J. A. Robinson. *Recent Advances in Two-Dimensional Materials beyond Graphene*. ACS Nano, vol. 9(12):11509–11539 (2015). [2](#)
- [7] R. Mas-Ballesté, C. Gómez-Navarro, J. Gómez-Herrero, & F. Zamora. *2D materials: to graphene and beyond*. Nanoscale, vol. 3(1):20–30 (2011). [2](#), [4](#), [35](#), [49](#)
- [8] A. Gupta, T. Sakthivel, & S. Seal. *Recent development in 2D materials beyond graphene*. Progress in Materials Science, vol. 73:44–126 (2015). [2](#), [4](#), [49](#)
- [9] B. Luo, G. Liu, & L. Wang. *Recent advances in 2D materials for photocatalysis*. Nanoscale, vol. 8(13):6904–6920 (2016). [2](#)

- [10] S. Yang, C. Jiang, & S. huai Wei. *Gas sensing in 2D materials*. Applied Physics Reviews, vol. 4(2):021304 (2017).
- [11] S. J. Kim, K. Choi, B. Lee, Y. Kim, & B. H. Hong. *Materials for Flexible, Stretchable Electronics: Graphene and 2D Materials*. Annual Review of Materials Research, vol. 45(1):63–84 (2015).
- [12] X. Ling, Y. Lin, Q. Ma, Z. Wang, Y. Song, L. Yu, S. Huang, W. Fang, X. Zhang, A. L. Hsu, Y. Bie, Y.-H. Lee, Y. Zhu, L. Wu, J. Li, P. Jarillo-Herrero, M. Dresselhaus, T. Palacios, & J. Kong. *Parallel Stitching of 2D Materials*. Advanced Materials, vol. 28(12):2322–2329 (2016). [2](#)
- [13] M. Vozmediano, M. Katsnelson, & F. Guinea. *Gauge fields in graphene*. Physics Reports, vol. 496(4-5):109–148 (2010). [2](#)
- [14] D. V. V. F. I. V. Fialkovsky & D. V. VASSILEVICH. *Quantum field theory in graphene*. International Journal of Modern Physics A, vol. 27(15):1260007 (2012). [39](#)
- [15] V. A. Miransky & I. A. Shovkovy. *Quantum field theory in a magnetic field: From quantum chromodynamics to graphene and Dirac semimetals*. Physics Reports, vol. 576:1–209 (2015). [2](#), [39](#)
- [16] A. H. C. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, & A. K. Geim. *The electronic properties of graphene*. Reviews of Modern Physics, vol. 81(1):109–162 (2009). [2](#), [3](#), [4](#), [9](#), [13](#), [18](#), [41](#), [42](#), [43](#), [48](#), [65](#)
- [17] N. Dombey. *Seventy years of the Klein paradox*. Physics Reports, vol. 315(1-3):41–58 (1999). [2](#), [45](#)
- [18] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, & A. K. Geim. *Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene*. Nature Physics, vol. 2(9):620–625 (2006). [2](#), [45](#)
- [19] C. Bai & X. Zhang. *Klein paradox and resonant tunneling in a graphene superlattice*. Physical Review B, vol. 76(7) (2007). [2](#), [45](#)
- [20] L. D. Landau. *On the Theory of Phase Transitions*. Phys. Z. Sowjet., vol. 11(26):26 (1937). [3](#), [41](#)
- [21] R. E. Peierls. *Bemerkungen uber umwandlungstemperaturen*. Helv. Phys. Acta., vol. 7(81-83) (1934). [3](#), [41](#)
- [22] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, & J. Hone. *Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene*. Science, vol. 321(5887):385–388 (2008). [3](#), [39](#)

- [23] K. Cao, S. Feng, Y. Han, L. Gao, T. H. Ly, Z. Xu, & Y. Lu. *Elastic straining of free-standing monolayer graphene*. Nature Communications, vol. 11(1) (2020). [3](#), [39](#)
- [24] E. Pop, V. Varshney, & A. K. Roy. *Thermal properties of graphene: Fundamentals and applications*. MRS Bulletin, vol. 37(12):1273–1281 (2012). [3](#), [39](#)
- [25] A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao, & C. N. Lau. *Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene*. Nano Letters, vol. 8(3):902–907 (2008). [3](#), [39](#)
- [26] A. A. Balandin. *Thermal properties of graphene and nanostructured carbon materials*. Nature Materials, vol. 10(8):569–581 (2011). [3](#)
- [27] K. F. Mak, M. Y. Sfeir, Y. Wu, C. H. Lui, J. A. Misewich, & T. F. Heinz. *Measurement of the Optical Conductivity of Graphene*. Physical Review Letters, vol. 101(19) (2008). [3](#)
- [28] Y.-W. Tan, Y. Zhang, K. Bolotin, Y. Zhao, S. Adam, E. H. Hwang, S. D. Sarma, H. L. Stormer, & P. Kim. *Measurement of Scattering Rate and Minimum Conductivity in Graphene*. Physical Review Letters, vol. 99(24) (2007).
- [29] J. Horng, C.-F. Chen, B. Geng, C. Girit, Y. Zhang, Z. Hao, H. A. Bechtel, M. Martin, A. Zettl, M. F. Crommie, Y. R. Shen, & F. Wang. *Drude conductivity of Dirac fermions in graphene*. Physical Review B, vol. 83(16) (2011). [3](#), [39](#)
- [30] D. Abergel, V. Apalkov, J. Berashevich, K. Ziegler, & T. Chakraborty. *Properties of graphene: a theoretical perspective*. Advances in Physics, vol. 59(4):261–482 (2010). [3](#)
- [31] N. M. R. Peres. *Colloquium: The transport properties of graphene: An introduction*. Reviews of Modern Physics, vol. 82(3):2673–2700 (2010). [3](#), [9](#), [41](#)
- [32] V. P. Gusynin & S. G. Sharapov. *Unconventional Integer Quantum Hall Effect in Graphene*. Physical Review Letters, vol. 95(14) (2005). [3](#), [48](#)
- [33] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, & P. Kim. *Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry’s phase in graphene*. Nature, vol. 438(7065):201–204 (2005). [3](#), [48](#)
- [34] P. R. Wallace. *The Band Theory of Graphite*. Physical Review, vol. 71(9):622–634 (1947). [3](#)
- [35] A. Iorio & G. Lambiase. *Quantum field theory in curved graphene spacetimes, Lobachevsky geometry, Weyl symmetry, Hawking effect, and all that*. Physical Review D, vol. 90(2) (2014). [3](#)

- [36] D. D. L. Chung. *Review Graphite*. Journal of Materials Science, vol. 37(8):1475–1489 (2002). [3](#), [39](#), [40](#)
- [37] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P. C. Eklund, & A. M. Rao. *Carbon Nanotubes*. In *Physics and Chemistry of Materials with Low-Dimensional Structures*, 331–379. Springer Netherlands (2000). [3](#), [39](#)
- [38] J. Liu. *Fullerene Pipes*. Science, vol. 280(5367):1253–1256 (1998). [3](#)
- [39] F. Wudl. *Fullerene materials*. Journal of Materials Chemistry, vol. 12(7):1959–1963 (2002). [3](#)
- [40] R. Saito, G. Dresselhaus, & M. S. Dresselhaus. *Physical Properties of Carbon Nanotubes*. PUBLISHED BY IMPERIAL COLLEGE PRESS AND DISTRIBUTED BY WORLD SCIENTIFIC PUBLISHING CO. (1998). [3](#), [41](#)
- [41] V. Popov. *Carbon nanotubes: properties and application*. Materials Science and Engineering: R: Reports, vol. 43(3):61–102 (2004). [3](#), [41](#)
- [42] J. Mintmire, D. Robertson, & C. White. *Properties of fullerene nanotubules*. Journal of Physics and Chemistry of Solids, vol. 54(12):1835–1840 (1993). [3](#)
- [43] F. Giacalone & N. Martín. *Fullerene Polymers: Synthesis and Properties*. Chemical Reviews, vol. 106(12):5136–5190 (2006). [3](#)
- [44] E. M. L. L. D. Landau. *Statistical Physics*. Elsevier Science & Technology (1996). [4](#)
- [45] B. Kelly. *Graphite—the most fascinating nuclear material*. Carbon, vol. 20(1):3–11 (1982). [4](#)
- [46] S. Balendhran, S. Walia, H. Nili, S. Sriram, & M. Bhaskaran. *Elemental Analogues of Graphene: Silicene, Germanene, Stanene, and Phosphorene*. Small, vol. 11(6):640–652 (2014). [4](#), [50](#)
- [47] Z. Lin et al. *2D materials advances: from large scale synthesis and controlled heterostructures to improved characterization techniques, defects and applications*. 2D Materials, vol. 3(4):042001 (2016). [4](#)
- [48] M. Houssa, A. Dimoulas, & A. Molle. *Silicene: a review of recent experimental and theoretical investigations*. Journal of Physics: Condensed Matter, vol. 27(25):253002 (2015). [4](#)
- [49] J. Zhao et al. *Rise of silicene: A competitive 2D material*. Progress in Materials Science, vol. 83:24–151 (2016). [49](#)

- [50] M. J. Spencer & T. Morishita, eds. *Silicene*. Springer International Publishing (2016). [4](#), [35](#), [49](#), [51](#), [52](#), [57](#)
- [51] S. Chowdhury & D. Jana. *A theoretical review on electronic, magnetic and optical properties of silicene*. Reports on Progress in Physics, vol. 79(12):126501 (2016). [4](#), [51](#)
- [52] M. E. Dávila, L. Xian, S. Cahangirov, A. Rubio, & G. L. Lay. *Germanene: a novel two-dimensional germanium allotrope akin to graphene and silicene*. New Journal of Physics, vol. 16(9):095002 (2014). [4](#)
- [53] A. Acun et al. *Germanene: the germanium analogue of graphene*. Journal of Physics: Condensed Matter, vol. 27(44):443002 (2015). [4](#), [49](#)
- [54] F. feng Zhu, W. jiong Chen, Y. Xu, C. lei Gao, D. dan Guan, C. hua Liu, D. Qian, S.-C. Zhang, & J. feng Jia. *Epitaxial growth of two-dimensional stanene*. Nature Materials, vol. 14(10):1020–1025 (2015). [4](#), [49](#)
- [55] M. Ezawa. *Monolayer Topological Insulators: Silicene, Germanene, and Stanene*. Journal of the Physical Society of Japan, vol. 84(12):121003 (2015). [4](#), [49](#), [51](#)
- [56] C.-C. Liu, H. Jiang, & Y. Yao. *Low-energy effective Hamiltonian involving spin-orbit coupling in silicene and two-dimensional germanium and tin*. Physical Review B, vol. 84(19):195430 (2011). [4](#), [49](#), [50](#), [51](#)
- [57] L. Kou, Y. Ma, Z. Sun, T. Heine, & C. Chen. *Two-Dimensional Topological Insulators: Progress and Prospects*. The Journal of Physical Chemistry Letters, vol. 8(8):1905–1919 (2017). [4](#)
- [58] C. Huang, J. Zhou, H. Wu, K. Deng, P. Jena, & E. Kan. *Quantum Phase Transition in Germanene and Stanene Bilayer: From Normal Metal to Topological Insulator*. The Journal of Physical Chemistry Letters, vol. 7(10):1919–1924 (2016). [4](#)
- [59] M. Ezawa. *Quantum Hall Effects in Silicene*. Journal of the Physical Society of Japan, vol. 81(6):064705 (2012). [4](#), [51](#)
- [60] H. Zhang, T. Zhou, J. Zhang, B. Zhao, Y. Yao, & Z. Yang. *Quantum anomalous Hall effect in stanene on a nonmagnetic substrate*. Physical Review B, vol. 94(23):235409 (2016).
- [61] H. Wang, S. T. Pi, J. Kim, Z. Wang, H. H. Fu, & R. Q. Wu. *Possibility of realizing quantum spin Hall effect at room temperature instanene/Al₂O₃(0001)*. Physical Review B, vol. 94(3):035112 (2016). [4](#)

- [62] S. D. Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, & E. Rossi. *Electronic transport in two-dimensional graphene*. *Reviews of Modern Physics*, vol. 83(2):407–470 (2011). 4, 41
- [63] Z. Ni, Q. Liu, K. Tang, J. Zheng, J. Zhou, R. Qin, Z. Gao, D. Yu, & J. Lu. *Tunable Bandgap in Silicene and Germanene*. *Nano Letters*, vol. 12(1):113–118 (2011). 4, 49
- [64] N. D. Drummond, V. Zólyomi, & V. I. Fal'ko. *Electrically tunable band gap in silicene*. *Physical Review B*, vol. 85(7):075423 (2012). 17, 49
- [65] S. M. Aghaei & I. Calizo. *Band gap tuning of armchair silicene nanoribbons using periodic hexagonal holes*. *Journal of Applied Physics*, vol. 118(10):104304 (2015). 4
- [66] L. Meng, Y. Wang, L. Zhang, S. Du, R. Wu, L. Li, Y. Zhang, G. Li, H. Zhou, W. A. Hofer, & H.-J. Gao. *Buckled Silicene Formation on Ir(111)*. *Nano Letters*, vol. 13(2):685–690 (2013). 4
- [67] B. Lalmi, H. Oughaddou, H. Enriquez, A. Kara, S. Vizzini, B. Ealet, & B. Aufray. *Epitaxial growth of a silicene sheet*. *Applied Physics Letters*, vol. 97(22):223109 (2010).
- [68] P. Vogt, P. D. Padova, C. Quaresima, J. Avila, E. Frantzeskakis, M. C. Asensio, A. Resta, B. Ealet, & G. L. Lay. *Silicene: Compelling Experimental Evidence for Graphenelike Two-Dimensional Silicon*. *Physical Review Letters*, vol. 108(15) (2012). 4
- [69] L. Kong, C. Bjelkevig, S. Gaddam, M. Zhou, Y. H. Lee, G. H. Han, H. K. Jeong, N. Wu, Z. Zhang, J. Xiao, P. A. Dowben, & J. A. Kelber. *Graphene/Substrate Charge Transfer Characterized by Inverse Photoelectron Spectroscopy*. *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 114(49):21618–21624 (2010). 4
- [70] T. Li & Z. Zhang. *Substrate-regulated morphology of graphene*. *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 43(7):075303 (2010). 4
- [71] M. Planck. *On the Theory of the Energy Distribution Law of the Normal Spectrum*. In *The Old Quantum Theory*, 82–90. Elsevier (1967). 5
- [72] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, J. B. Sykes, J. S. Bell, & M. E. Rose. *Quantum Mechanics, Non-Relativistic Theory: Vol. 3 of Course of Theoretical Physics*. *Physics Today*, vol. 11(12):56–59 (1958). 5
- [73] W. De Haas & P. Van Alphen. *Oscillations in the Magnetization of Bismuth*. *Leiden Commun*, vol. 208:212a (1930). 5, 9

- [74] L. Onsager. *Interpretation of the de Haas-van Alphen effect*. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, vol. 43(344):1006–1008 (1952). 5
- [75] D. T. Haar. *The Old Quantum Theory*. Elsevier (1967). 5
- [76] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, & F. Laloe. *Quantum Mechanics, Volume 1*. John Wiley & Sons Inc (1977). 5, 6, 11, 30, 46, 47, 50
- [77] D. J. Griffiths. *Introduction to Electrodynamics*. Cambridge University Press (2017). 5
- [78] H. Goldstein, C. Poole, J. Safko, & S. R. Addison. *Classical Mechanics, 3rd ed.* American Journal of Physics, vol. 70(7):782–783 (2002). 5
- [79] A. Wachter. *Relativistic Quantum Mechanics*. Springer Netherlands (2011). 6, 44, 50
- [80] H. Pilkuhn. *Relativistic Quantum Mechanics*. Springer-Verlag (2005). 6, 44, 52
- [81] L. Landau. *Diamagnetismus der Metalle*. Zeitschrift für Physik, vol. 64(9-10):629–637 (1930). 6, 10
- [82] M. O. Goerbig. *Electronic properties of graphene in a strong magnetic field*. Reviews of Modern Physics, vol. 83(4):1193–1243 (2011). 6, 9, 13, 25, 44, 47, 48, 57, 65
- [83] D. Shoenberg. *Magnetic oscillations in metals*. Cambridge University Press (1984). 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 14, 24, 28, 29, 75, 100, 106
- [84] E. McCann & M. Koshino. *The electronic properties of bilayer graphene*. Reports on Progress in Physics, vol. 76(5):056503 (2013). 6, 57
- [85] D. Shoenberg. *Magnetization of a two-dimensional electron gas*. Journal of Low Temperature Physics, vol. 56(5-6):417–440 (1984). 7, 14, 24, 76
- [86] S. G. Sharapov, V. P. Gusynin, & H. Beck. *Magnetic oscillations in planar systems with the Dirac-like spectrum of quasiparticle excitations*. Physical Review B, vol. 69(7):075104 (2004). 7, 8, 9, 11, 12, 13, 70, 72, 106, 136
- [87] G. P. Tolstov. *Fourier Series*. Dover Publications Inc. (1976). 7, 26
- [88] C. J. Tabert, J. P. Carbotte, & E. J. Nicol. *Magnetic properties of Dirac fermions in a buckled honeycomb lattice*. Physical Review B, vol. 91(3):035423 (2015). 8, 9, 13, 51, 92

- [89] P. Grigoriev. *The influence of the chemical potential oscillations on the de Haas-van Alphen effect in quasi-two-dimensional compounds*. Journal of Experimental and Theoretical Physics, vol. 92(6):1090–1094 (2001). 9, 100
- [90] T. Champel. *Chemical potential oscillations and de Haas–van Alphen effect*. Physical Review B, vol. 64(5):054407 (2001). 9, 100
- [91] I. A. Luk'yanchuk. *De Haas–van Alphen effect in 2D systems: application to mono- and bilayer graphene*. Low Temperature Physics, vol. 37(1):45–48 (2011). 9, 70
- [92] J.-Y. Fortin & A. Audouard. *Effect of electronic band dispersion curvature on de Haas–van Alphen oscillations*. The European Physical Journal B, vol. 88(225):225 (2015).
- [93] C. J. Tabert & J. P. Carbotte. *Magnetization of the metallic surface states in topological insulators*. Journal of Physics: Condensed Matter, vol. 27(1):015008 (2014).
- [94] J.-Y. Fortin & A. Audouard. *de Haas–van Alphen oscillations with non-parabolic dispersions*. The European Physical Journal B, vol. 90(60):60 (2017).
- [95] N. A. Zimbovskaya. *On the de Haas–van Alphen oscillations in quasi-two-dimensional metals: effect of the Fermi surface curvature*. Journal of Physics: Condensed Matter, vol. 19(17):176227 (2007).
- [96] S. Becker & M. Zworski. *Magnetic Oscillations in a Model of Graphene*. Communications in Mathematical Physics, vol. 367(3):941–989 (2019). 9
- [97] J. J. Vuillemin. *De Haas–van Alphen Effect and Fermi Surface in Palladium*. Physical Review, vol. 144(2):396–405 (1966). 9
- [98] E. A. Yelland, J. R. Cooper, A. Carrington, N. E. Hussey, P. J. Meeson, S. Lee, A. Yamamoto, & S. Tajima. *de Haas–van Alphen Effect in Single Crystal MgB₂*. Physical Review Letters, vol. 88(21) (2002).
- [99] *Amplitude of the de Haas—van Alphen effect in mercury*. Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences, vol. 329(1576):17–34 (1972).
- [100] M. A. Itskovsky, S. Askenazy, T. Maniv, I. D. Vagner, E. Balthes, & D. Schweitzer. *Spin-split de Haas–van Alphen effect in two-dimensional electron systems*. Physical Review B, vol. 58(20):R13347–R13350 (1998). 9
- [101] I. Lifshitz & A. Kosevich. *Theory of magnetic susceptibility in metals at low temperatures*. Sov. Phys. JETP, vol. 2(4):636–645 (1956). 10, 11

- [102] D. Shoenberg. *The de haas-van alphen effect in copper, silver and gold*. Philosophical Magazine, vol. 5(50):105–110 (1960). [10](#)
- [103] R. J. Sladek, E. R. Gertner, & D. G. Seiler. *de Haas—van Alphen Effect in InSb*. Physical Review B, vol. 3(8):2608–2613 (1971). [10](#)
- [104] T. Ando, A. B. Fowler, & F. Stern. *Electronic properties of two-dimensional systems*. Reviews of Modern Physics, vol. 54(2):437–672 (1982). [11](#), [12](#), [22](#), [25](#), [43](#), [46](#), [47](#), [48](#), [56](#), [57](#)
- [105] R. B. Dingle. *Some magnetic properties of metals II. The influence of collisions on the magnetic behaviour of large systems*. Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences, vol. 211(1107):517–525 (1952). [11](#)
- [106] F. B. Mancoff, L. J. Zielinski, C. M. Marcus, K. Campman, & A. C. Gossard. *Shubnikov-de Haas oscillations in a two-dimensional electron gas in a spatially random magnetic field*. Physical Review B, vol. 53(12):R7599–R7602 (1996). [11](#)
- [107] M. L. Leadbeater, E. S. Alves, L. Eaves, M. Henini, O. H. Hughes, A. Celeste, J. C. Portal, G. Hill, & M. A. Pate. *Magnetic field studies of elastic scattering and optic-phonon emission in resonant-tunneling devices*. Physical Review B, vol. 39(5):3438–3441 (1989). [11](#)
- [108] A. Potts et al. *Magnetization studies of Landau level broadening in two-dimensional electron systems*. Journal of Physics: Condensed Matter, vol. 8(28):5189–5207 (1996). [12](#)
- [109] C. H. Yang, F. M. Peeters, & W. Xu. *Landau-level broadening due to electron-impurity interaction in graphene in strong magnetic fields*. Physical Review B, vol. 82(7):075401 (2010). [12](#), [48](#)
- [110] P. de Faget de Casteljau & J. Friedel. *Étude de la résistivité et du pouvoir thermoélectrique des impuretés dissoutes dans les métaux nobles*. Journal de Physique et le Radium, vol. 17(1):27–32 (1956). [14](#)
- [111] J. Friedel. *ON SOME ELECTRICAL AND MAGNETIC PROPERTIES OF METALLIC SOLID SOLUTIONS*. Canadian Journal of Physics, vol. 34(12A):1190–1211 (1956).
- [112] J. Friedel. *Sur la structure électronique des métaux et alliages de transition et des métaux lourds*. Journal de Physique et le Radium, vol. 19(6):573–581 (1958).
- [113] J. Friedel. *Metallic alloys*. Il Nuovo Cimento, vol. 7(S2):287–311 (1958). [14](#)

- [114] B. T. Matthias, M. Peter, H. J. Williams, A. M. Clogston, E. Corenzwit, & R. C. Sherwood. *Magnetic Moment of Transition Metal Atoms in Dilute Solution and Their Effect on Superconducting Transition Temperature*. Physical Review Letters, vol. 5(12):542–544 (1960). [14](#)
- [115] D. R. Hartree. *The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. Part II. Some Results and Discussion*. Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, vol. 24(1):111–132 (1928). [15](#)
- [116] V. Fock. *Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems*. Zeitschrift für Physik, vol. 61(1-2):126–148 (1930). [15](#)
- [117] C. J. J. Brian H. Bransden. *Physics of Atoms and Molecules*. Prentice Hall (2003). [15](#), [36](#)
- [118] P. W. Anderson. *Localized Magnetic States in Metals*. Physical Review, vol. 124(1):41–53 (1961). [15](#), [16](#), [17](#), [36](#), [38](#), [143](#), [153](#)
- [119] A. Groß. *Theoretical Surface Science*. Springer Berlin Heidelberg (2014). [17](#)
- [120] G. D. Mahan. *Impurity resonances in carbon nanotubes*. Physical Review B, vol. 69(12) (2004). [17](#)
- [121] H. Raza, ed. *Graphene Nanoelectronics*. Springer-Verlag GmbH (2012). [17](#)
- [122] J.-M. Carter, V. V. Shankar, M. A. Zeb, & H.-Y. Kee. *Semimetal and Topological Insulator in Perovskite Iridates*. Physical Review B, vol. 85(11) (2012). [17](#)
- [123] B. Uchoa, V. N. Kotov, N. M. R. Peres, & A. H. C. Neto. *Localized Magnetic States in Graphene*. Physical Review Letters, vol. 101(2) (2008). [17](#), [18](#), [143](#), [149](#), [151](#), [153](#)
- [124] R. Ströbel, J. Garche, P. Moseley, L. Jörissen, & G. Wolf. *Hydrogen storage by carbon materials*. Journal of Power Sources, vol. 159(2):781–801 (2006). [18](#)
- [125] J. Ardenghi, P. Bechthold, P. Jasen, E. Gonzalez, & A. Juan. *Dynamical diffusion and renormalization group equation for the Fermi velocity in doped graphene*. Physica B: Condensed Matter, vol. 452:92–101 (2014). [18](#)
- [126] P. O. Lehtinen, A. S. Foster, Y. Ma, A. V. Krasheninnikov, & R. M. Nieminen. *Irradiation-Induced Magnetism in Graphite: A Density Functional Study*. Physical Review Letters, vol. 93(18) (2004). [18](#)
- [127] Y. V. Skrypnik & V. M. Loktev. *Impurity effects in a two-dimensional system with the Dirac spectrum*. Physical Review B, vol. 73(24) (2006). [18](#)

- [128] J. O. Sofo, G. Usaj, P. S. Cornaglia, A. M. Suarez, A. D. Hernández-Nieves, & C. A. Balseiro. *Magnetic structure of hydrogen-induced defects on graphene*. Physical Review B, vol. 85(11) (2012). [18](#)
- [129] T. Wehling, M. Katsnelson, & A. Lichtenstein. *Adsorbates on graphene: Impurity states and electron scattering*. Chemical Physics Letters, vol. 476(4-6):125–134 (2009). [18](#)
- [130] J. Ardenghi, P. Bechthold, E. Gonzalez, P. Jasen, & A. Juan. *Ballistic transport properties in pristine/doped/pristine graphene junctions*. Superlattices and Microstructures, vol. 72:325–335 (2014).
- [131] J. S. Ardenghi, P. Bechthold, E. Gonzalez, P. Jasen, & A. Juan. *Valley properties of doped graphene in a magnetic field*. The European Physical Journal B, vol. 88(47):47 (2015).
- [132] J. Ardenghi, P. Bechthold, P. Jasen, E. Gonzalez, & O. Nagel. *Landau level transitions in doped graphene in a time dependent magnetic field*. Physica B: Condensed Matter, vol. 427:97–105 (2013). [18](#)
- [133] T. Yildirim & S. Ciraci. *Titanium-Decorated Carbon Nanotubes as a Potential High-Capacity Hydrogen Storage Medium*. Physical Review Letters, vol. 94(17) (2005). [18](#)
- [134] K. R. S. Chandrakumar & S. K. Ghosh. *Alkali-Metal-Induced Enhancement of Hydrogen Adsorption in C60Fullerene: Anab InitioStudy*. Nano Letters, vol. 8(1):13–19 (2008). [18](#)
- [135] J. Kong, M. G. Chapline, & H. Dai. *Functionalized Carbon Nanotubes for Molecular Hydrogen Sensors*. Advanced Materials, vol. 13(18):1384–1386 (2001). [18](#)
- [136] R. Mota, S. B. Fagan, & A. Fazzio. *First principles study of titanium-coated carbon nanotubes as sensors for carbon monoxide molecules*. Surface Science, vol. 601(18):4102–4104 (2007).
- [137] J. M. Planeix, N. Coustel, B. Coq, V. Brotons, P. S. Kumbhar, R. Dutartre, P. Geneste, P. Bernier, & P. M. Ajayan. *Application of Carbon Nanotubes as Supports in Heterogeneous Catalysis*. Journal of the American Chemical Society, vol. 116(17):7935–7936 (1994).
- [138] Y. Li, Z. Zhou, G. Yu, W. Chen, & Z. Chen. *CO Catalytic Oxidation on Iron-Embedded Graphene: Computational Quest for Low-Cost Nanocatalysts*. The Journal of Physical Chemistry C, vol. 114(14):6250–6254 (2010).

- [139] A. Javey, J. Guo, D. B. Farmer, Q. Wang, D. Wang, R. G. Gordon, M. Lundstrom, & H. Dai. *Carbon Nanotube Field-Effect Transistors with Integrated Ohmic Contacts and High- k Gate Dielectrics*. Nano Letters, vol. 4(3):447–450 (2004). 18
- [140] W. Han, R. K. Kawakami, M. Gmitra, & J. Fabian. *Graphene spintronics*. Nature Nanotechnology, vol. 9(10):794–807 (2014). 18
- [141] A. Candini, S. Klyatskaya, M. Ruben, W. Wernsdorfer, & M. Affronte. *Graphene Spintronic Devices with Molecular Nanomagnets*. Nano Letters, vol. 11(7):2634–2639 (2011). 18
- [142] Y.-W. Son, M. L. Cohen, & S. G. Louie. *Half-metallic graphene nanoribbons*. Nature, vol. 444(7117):347–349 (2006). 18
- [143] V. M. Karpan, G. Giovannetti, P. A. Khomyakov, M. Talanana, A. A. Starikov, M. Zwierzycki, J. van den Brink, G. Brocks, & P. J. Kelly. *Graphite and Graphene as Perfect Spin Filters*. Physical Review Letters, vol. 99(17) (2007).
- [144] N. Tombros, C. Jozsa, M. Popinciuc, H. T. Jonkman, & B. J. van Wees. *Electronic spin transport and spin precession in single graphene layers at room temperature*. Nature, vol. 448(7153):571–574 (2007). 18, 48
- [145] R. Xiao, D. Fritsch, M. D. Kuz'min, K. Koepernik, H. Eschrig, M. Richter, K. Vietze, & G. Seifert. *Co Dimers on Hexagonal Carbon Rings Proposed as Subnanometer Magnetic Storage Bits*. Physical Review Letters, vol. 103(18) (2009). 19
- [146] J. Berashevich & T. Chakraborty. *Tunable band gap and magnetic ordering by adsorption of molecules on graphene*. Physical Review B, vol. 80(3) (2009). 19
- [147] X. Liu, C. Z. Wang, Y. X. Yao, W. C. Lu, M. Hupalo, M. C. Tringides, & K. M. Ho. *Bonding and charge transfer by metal adatom adsorption on graphene*. Physical Review B, vol. 83(23) (2011). 19
- [148] K. Sengupta & G. Baskaran. *Tuning Kondo physics in graphene with gate voltage*. Physical Review B, vol. 77(4) (2008). 19, 58, 114
- [149] S. Cho, Y.-F. Chen, & M. S. Fuhrer. *Gate-tunable graphene spin valve*. Applied Physics Letters, vol. 91(12):123105 (2007). 19, 58, 114
- [150] S. K. Pati, T. Enoki, & C. N. R. Rao. *Graphene and Its Fascinating Attributes*. WORLD SCIENTIFIC (2011). 19

- [151] C. Lu, Q. Fu, S. Huang, & J. Liu. *Polymer Electrolyte-Gated Carbon Nanotube Field-Effect Transistor*. Nano Letters, vol. 4(4):623–627 (2004). [19](#)
- [152] A. Das, A. K. Sood, A. Govindaraj, A. M. Saitta, M. Lazzeri, F. Mauri, & C. N. R. Rao. *Doping in Carbon Nanotubes Probed by Raman and Transport Measurements*. Physical Review Letters, vol. 99(13) (2007). [19](#)
- [153] H. Kerson Huang. *Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons (1987). [20](#), [21](#), [57](#), [100](#)
- [154] D. McQuarrie. *Statistical mechanics*. University Science Books, Sausalito, Calif (2000). [20](#), [21](#), [29](#), [57](#), [61](#), [100](#), [114](#)
- [155] V. Lukose, R. Shankar, & G. Baskaran. *Novel Electric Field Effects on Landau Levels in Graphene*. Physical Review Letters, vol. 98(11):116802 (2007). [23](#), [56](#), [57](#)
- [156] T. M. Apostol. *An Elementary View of Euler's Summation Formula*. The American Mathematical Monthly, vol. 106(5):409–418 (1999). [23](#)
- [157] G. Arfken. *Mathematical methods for physicists*. Elsevier, Boston (2005). [23](#)
- [158] Z. Jiang, E. A. Henriksen, L. C. Tung, Y.-J. Wang, M. E. Schwartz, M. Y. Han, P. Kim, & H. L. Stormer. *Infrared Spectroscopy of Landau Levels of Graphene*. Physical Review Letters, vol. 98(19) (2007). [23](#)
- [159] J. L. Lado & J. Fernández-Rossier. *Landau levels in 2D materials using Wannier Hamiltonians obtained by first principles*. 2D Materials, vol. 3(3):035023 (2016). [23](#)
- [160] H. B. Callen. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. John Wiley & Sons (1985). [25](#)
- [161] S. J. B. Tom Lancaster. *Quantum Field Theory for the Gifted Amateur*. Oxford University Press(UK) (2014). [30](#), [31](#), [32](#), [35](#), [146](#)
- [162] N. Ashcroft. *Solid state physics*. Cengage Learning, Andover England (1976). [33](#), [43](#), [46](#)
- [163] C. Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. John Wiley & Sons Inc (2004). [33](#), [43](#), [44](#)
- [164] B. S. Alexander Altland. *Condensed Matter Field Theory*. Cambridge University Pr. (2010). [33](#), [35](#), [36](#)
- [165] J. H. Wood. *Wave Functions for IronBand*. Physical Review, vol. 117(3):714–718 (1960). [36](#)

- [166] J. Rammer. *Quantum Transport Theory*. Taylor & Francis Ltd (2019). [37](#)
- [167] E. N. Economou. *Green's Functions in Quantum Physics*. Springer Berlin Heidelberg (2006). [37](#), [45](#), [46](#)
- [168] *Electron correlations in narrow energy bands*. Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences, vol. 276(1365):238–257 (1963). [37](#)
- [169] A. C. Hewson. *Theory of Localized Magnetic States in Metals*. Physical Review, vol. 144(2):420–427 (1966). [38](#)
- [170] D. R. K. Lawrence S. Pan, ed. *Diamond: Electronic Properties and Applications*. Springer US (1994). [40](#)
- [171] M. Dresselhaus, G. Dresselhaus, & R. Saito. *Physics of carbon nanotubes*. Carbon, vol. 33(7):883–891 (1995). [41](#)
- [172] B. Q. Wei, R. Vajtai, & P. M. Ajayan. *Reliability and current carrying capacity of carbon nanotubes*. Applied Physics Letters, vol. 79(8):1172–1174 (2001). [41](#)
- [173] Z. Yao, C. L. Kane, & C. Dekker. *High-Field Electrical Transport in Single-Wall Carbon Nanotubes*. Physical Review Letters, vol. 84(13):2941–2944 (2000). [41](#)
- [174] N. D. Mermin. *Crystalline Order in Two Dimensions*. Physical Review, vol. 176(1):250–254 (1968). [41](#)
- [175] Y. Imry & L. Gunther. *Fluctuations and Physical Properties of the Two-Dimensional Crystal Lattice*. Physical Review B, vol. 3(11):3939–3945 (1971). [41](#)
- [176] J. C. Meyer, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, T. J. Booth, & S. Roth. *The structure of suspended graphene sheets*. Nature, vol. 446(7131):60–63 (2007). [41](#)
- [177] P. Atkins, J. Depaula, J. Keeler, & J. de Paula. *Atkins' Physical Chemistry*. Oxford University Press (2018). [41](#)
- [178] J. P. Hobson & W. A. Nierenberg. *The Statistics of a Two-Dimensional, Hexagonal Net*. Physical Review, vol. 89(3):662–662 (1953). [45](#)
- [179] C. Bena & S. A. Kivelson. *Quasiparticle scattering and local density of states in graphite*. Physical Review B, vol. 72(12) (2005). [45](#)
- [180] R. Peierls. *Zur Theorie des Diamagnetismus von Leitungselektronen*. Zeitschrift für Physik, vol. 80(11-12):763–791 (1933). [46](#), [53](#)

- [181] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. John Wiley & Sons Inc (1998). 46
- [182] S. İslamoğlu, M. . Oktel, & O. Gülseren. *Hofstadter butterfly of graphene with point defects*. Physical Review B, vol. 85(23) (2012). 46
- [183] B. Hunt, J. D. Sanchez-Yamagishi, A. F. Young, M. Yankowitz, B. J. LeRoy, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Moon, M. Koshino, P. Jarillo-Herrero, & R. C. Ashoori. *Massive Dirac Fermions and Hofstadter Butterfly in a van der Waals Heterostructure*. Science, vol. 340(6139):1427–1430 (2013). 46
- [184] L. D. Landau. *Electrodynamics of continuous media*. Butterworth-Heinemann, Oxford England (1984). 46
- [185] P. Zeeman. *The Effect of Magnetisation on the Nature of Light Emitted by a Substance*. Nature, vol. 55(1424):347–347 (1897). 46
- [186] M. Higuchi, D. B. Hamal, A. Shrestha, & K. Higuchi. *Reduced Effective g-Factor in Graphene*. Journal of the Physical Society of Japan, vol. 88(9):094707 (2019). 46, 53
- [187] M. L. Sadowski, G. Martinez, M. Potemski, C. Berger, & W. A. de Heer. *Landau Level Spectroscopy of Ultrathin Graphite Layers*. Physical Review Letters, vol. 97(26) (2006). 48
- [188] Y. J. Song, A. F. Otte, Y. Kuk, Y. Hu, D. B. Torrance, P. N. First, W. A. de Heer, H. Min, S. Adam, M. D. Stiles, A. H. MacDonald, & J. A. Stroscio. *High-resolution tunnelling spectroscopy of a graphene quartet*. Nature, vol. 467(7312):185–189 (2010).
- [189] C. Faugeras, S. Berciaud, P. Leszczynski, Y. Henni, K. Nogajewski, M. Orlita, T. Taniguchi, K. Watanabe, C. Forsythe, P. Kim, R. Jalil, A. Geim, D. Basko, & M. Potemski. *Landau Level Spectroscopy of Electron-Electron Interactions in Graphene*. Physical Review Letters, vol. 114(12) (2015). 48
- [190] C. L. Kane & E. J. Mele. *Quantum Spin Hall Effect in Graphene*. Physical Review Letters, vol. 95(22) (2005). 48
- [191] K. S. Novoselov, Z. Jiang, Y. Zhang, S. V. Morozov, H. L. Stormer, U. Zeitler, J. C. Maan, G. S. Boebinger, P. Kim, & A. K. Geim. *Room-Temperature Quantum Hall Effect in Graphene*. Science, vol. 315(5817):1379–1379 (2007). 48
- [192] M. Ezawa. *A topological insulator and helical zero mode in silicene under an inhomogeneous electric field*. New Journal of Physics, vol. 14(3):033003 (2012). 49

- [193] M. Ezawa. *Spin valleytronics in silicene: Quantum spin Hall–quantum anomalous Hall insulators and single-valley semimetals*. Physical Review B, vol. 87(15) (2013). [49](#)
- [194] Y. Xu, B. Yan, H.-J. Zhang, J. Wang, G. Xu, P. Tang, W. Duan, & S.-C. Zhang. *Large-Gap Quantum Spin Hall Insulators in Tin Films*. Physical Review Letters, vol. 111(13) (2013). [49](#)
- [195] H. Min, J. E. Hill, N. A. Sinitsyn, B. R. Sahu, L. Kleinman, & A. H. MacDonald. *Intrinsic and Rashba spin-orbit interactions in graphene sheets*. Physical Review B, vol. 74(16) (2006). [49](#), [51](#)
- [196] K. Cho, J. Yang, & Y. Lu. *Phosphorene: An emerging 2D material*. Journal of Materials Research, vol. 32(15):2839–2847 (2017). [50](#)
- [197] E. I. Rashba. *Spin Dynamics and Spin Transport*. Journal of Superconductivity, vol. 18(2):137–144 (2005). [51](#)
- [198] R. Winkler. *Spin-orbit Coupling Effects in Two-dimensional Electron and Hole Systems*. Springer-Verlag GmbH (2003). [51](#)
- [199] J. R. Schaibley, H. Yu, G. Clark, P. Rivera, J. S. Ross, K. L. Seyler, W. Yao, & X. Xu. *Valleytronics in 2D materials*. Nature Reviews Materials, vol. 1(16055):16055 (2016). [53](#)
- [200] Y.-J. Yu, Y. Zhao, S. Ryu, L. E. Brus, K. S. Kim, & P. Kim. *Tuning the Graphene Work Function by Electric Field Effect*. Nano Letters, vol. 9(10):3430–3434 (2009). [58](#)
- [201] B. Uchoa, T. G. Rappoport, & A. H. C. Neto. *Kondo Quantum Criticality of Magnetic Adatoms in Graphene*. Physical Review Letters, vol. 106(1) (2011). [145](#), [147](#), [149](#)

Lista de Publicaciones

El trabajo de investigación realizado en esta tesis ha dado lugar a las siguientes publicaciones en revistas SCI:

- F. Escudero, J. S. Ardenghi, L. Sourrouille, P. Jasen, *Magnetization in pristine graphene with Zeeman splitting and variable spin-orbit coupling*. Superlattices and Microstructures **101** 537-546 (2017). DOI: [10.1016/j.spmi.2016.10.086](https://doi.org/10.1016/j.spmi.2016.10.086) (Capítulo 4)
- F. Escudero, J. S. Ardenghi, L. Sourrouille, P. Jasen, *Ground state magnetization of conduction electrons in graphene with Zeeman effect*. Journal of Magnetism and Magnetic Materials **429** 294-298 (2017). DOI: [10.1016/j.jmmm.2016.12.032](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2016.12.032) (Capítulo 4)
- F. Escudero, J. S. Ardenghi, L. Sourrouille, P. Jasen, A. Juan, *Formation of localized magnetic states in graphene in hollow-site adsorbed adatoms*. Superlattices and Microstructures **113** 291-300 (2018). DOI: [10.1016/j.spmi.2017.11.007](https://doi.org/10.1016/j.spmi.2017.11.007) (Capítulo 6)
- F. Escudero, J. S. Ardenghi, P. Jasen, *Magnetic oscillations in silicene*. Journal of Magnetism and Magnetic Materials **454** 131-138 (2018). DOI: [10.1016/j.jmmm.2018.01.060](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2018.01.060) (Capítulo 4)
- F. Escudero, J. S. Ardenghi, P. Jasen, *Influence of temperature on the magnetic oscillations in graphene with spin splitting: a new approach*. Journal of Physics: Condensed Matter **30** 275803 (2018). DOI: [10.1088/1361-648X/aac7ea](https://doi.org/10.1088/1361-648X/aac7ea) (Capítulos 4 y 5)
- F. Escudero, J. S. Ardenghi, P. Jasen, *Temperature effect on the magnetic oscillations in 2D materials*. Journal of Physics: Condensed Matter **31** 285804 (2019). DOI: [10.1088/1361-648X/ab14b6](https://doi.org/10.1088/1361-648X/ab14b6) (Capítulos 4 y 5)
- F. Escudero, J. S. Ardenghi, P. Jasen, *A general formulation for the magnetic oscillations in two dimensional systems*. European Physical Journal B **93** 93 (2020). DOI: [10.1140/epjb/e2020-10088-3](https://doi.org/10.1140/epjb/e2020-10088-3) (Capítulos 4 y 5)

Lista de Publicaciones

Otras publicaciones realizadas en el marco de las investigaciones llevadas a cabo durante el doctorado:

- F. Escudero, J. S. Ardenghi, P. Jasen, A. Juan, *Impurity effects in the magnetic oscillations on doped graphene with Zeeman splitting*. Physica B: Condensed Matter **518** 39-46 (2017). DOI: [10.1016/j.physb.2017.05.012](https://doi.org/10.1016/j.physb.2017.05.012)
- J. S. Ardenghi, A. Juan, F. Escudero, L. Sourrouille *Analytic solution for gauged Dirac-Weyl equation in (2 + 1)-dimensions*. Europhysics Letters **118** 21001 (2017). DOI: [10.1209/0295-5075/118/21001](https://doi.org/10.1209/0295-5075/118/21001)
- J. Villareal, F. Escudero, J. S. Ardenghi, P. Jasen, *Formation of localized magnetic states in silicene in an external electric field*. Superlattices and Microstructures **130** 285-296 (2019). DOI: [10.1016/j.spmi.2019.04.036](https://doi.org/10.1016/j.spmi.2019.04.036)
- F. Escudero, J. S. Ardenghi, P. Jasen, *Heat capacity in doped graphene under magnetic fields: the role of spin splitting*. Journal of Physics: Condensed Matter **32** 455402 (2020). DOI: [10.1088/1361-648X/ababe0](https://doi.org/10.1088/1361-648X/ababe0)

Ademas, esta tesis dio lugar a las siguientes presentaciones a congresos:

- F. Escudero, J. S. Ardenghi, P. Jasen, Influencia de la temperatura en las oscilaciones magnéticas en materiales 2D (*Influence of temperature on the magnetic oscillations in 2D materials*). RAFA 2018, Buenos Aires, Argentina, 17 Sep - 21 Sep (2018). (Capítulos 4 y 5)
- F. Escudero, J. S. Ardenghi, P. Jasen, Efecto de diferentes distribuciones de impurezas en las oscilaciones magnéticas en grafeno (*Effect of different impurity distributions in the magnetic oscillations in graphene*). RAFA 2019, Santa Fe, Argentina, 30 Sep - 03 Oct (2019). (Capítulo 5)