



**Universidad Nacional Mayor de San Marcos**

**Universidad del Perú. Decana de América**

Dirección General de Estudios de Posgrado

Facultad de Ciencias Físicas

Unidad de Posgrado

**Geometría y descripción relativista de los grados  
de libertad electrónicos en el grafeno**

**TESIS**

Para optar el Grado Académico de Magíster en Física con  
mención en Física Nuclear

**AUTOR**

Nicolás FERNANDEZ

**ASESOR**

Dr. Teófilo VARGAS AUCCALLA

Lima, Perú

2023



Reconocimiento - No Comercial - Compartir Igual - Sin restricciones adicionales

<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>

Usted puede distribuir, remezclar, retocar, y crear a partir del documento original de modo no comercial, siempre y cuando se dé crédito al autor del documento y se licencien las nuevas creaciones bajo las mismas condiciones. No se permite aplicar términos legales o medidas tecnológicas que restrinjan legalmente a otros a hacer cualquier cosa que permita esta licencia.

## Referencia bibliográfica

---

Fernandez, N. (2023). *Geometría y descripción relativista de los grados de libertad electrónicos en el grafeno*. [Tesis de maestría, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Facultad de Ciencias Físicas, Unidad de Posgrado]. Repositorio institucional Cybertesis UNMSM.

---

## Metadatos complementarios

<b>Datos de autor</b>	
Nombres y apellidos	Nicolás Fernandez
Tipo de documento de identidad	Pasaporte
Número de documento de identidad	AR / AAG160248
URL de ORCID	<a href="https://orcid.org/0000-0001-9906-2049">https://orcid.org/0000-0001-9906-2049</a>
<b>Datos de asesor</b>	
Nombres y apellidos	Teófilo Vargas Auccalla
Tipo de documento de identidad	DNI
Número de documento de identidad	06532544
URL de ORCID	<a href="https://orcid.org/0000-0002-9833-3887">https://orcid.org/0000-0002-9833-3887</a>
<b>Datos del jurado</b>	
<b>Presidente del jurado</b>	
Nombres y apellidos	Carlos Javier Solano Salinas
Tipo de documento	DNI
Número de documento de identidad	06445870
<b>Miembro del jurado 1</b>	
Nombres y apellidos	Raúl Félix Carita Montero
Tipo de documento	DNI
Número de documento de identidad	08385676
<b>Miembro del jurado 2</b>	
Nombres y apellidos	Héctor Raúl Loro Ramírez
Tipo de documento	DNI
Número de documento de identidad	08599217
<b>Miembro del jurado 3</b>	
Nombres y apellidos	No tuvo
Tipo de documento	-

Número de documento de identidad	-
<b>Datos de investigación</b>	
Línea de investigación	A.2.1.6. Cristalografía y Sistemas Cristalinos Bidimensionales
Grupo de investigación	No aplica
Agencia de financiamiento	No aplica
Ubicación geográfica de la investigación	Universidad Nacional Mayor de San Marcos 12.0562° S, 77.0845° W
Año o rango de años en que se realizó la investigación	Abril 2022 - Octubre 2022
URL de disciplinas OCDE	Física atómica, molecular y química <a href="https://purl.org/pe-repo/ocde/ford#1.03.01">https://purl.org/pe-repo/ocde/ford#1.03.01</a>  Física de la materia condensada <a href="https://purl.org/pe-repo/ocde/ford#1.03.02">https://purl.org/pe-repo/ocde/ford#1.03.02</a>  Física nuclear <a href="https://purl.org/pe-repo/ocde/ford#1.03.04">https://purl.org/pe-repo/ocde/ford#1.03.04</a>



UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS

Universidad del Perú. Decana de América

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

UNIDAD DE POSGRADO

**ACTA DE SUSTENTACIÓN DE TESIS EN LA MODALIDAD PRESENCIAL**  
**PARA OPTAR EL GRADO ACADÉMICO DE MAGISTER EN FÍSICA**  
**CON MENCIÓN EN FÍSICA NUCLEAR**

Siendo las 2:00 pm del 9 de junio de 2023, en el salón 304 de la Unidad de Posgrado de la Facultad de Ciencias Físicas de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos, se reunieron los siguientes miembros del Jurado Examinador:

Dr. Carlos Javier Solano Salinas	(Presidente)
Dr. Raúl Félix Carita Montero	(Miembro)
Dr. Héctor Raúl Loro Ramírez	(Miembro externo)
Dr. Teófilo Vargas Auccalla	(Asesor)

Para la sustentación oral y pública de la tesis para optar el Grado Académico de Magíster en Física con mención en Física Nuclear, del Ing. Nicolás Fernandez con código de matrícula N°20137004.

Después de darse lectura al expediente de Grado, en el que consta haberse cumplido con todas las disposiciones reglamentarias, los señores miembros del Jurado Examinador atendieron a la exposición de la tesis titulada:

**“Geometría y descripción relativista de los grados de libertad electrónicos en el grafeno”**

Concluida la exposición del candidato y luego de las preguntas de rigor por parte del Jurado Examinador, los asistentes y el tesista se retiraron del salón 304, para que el presidente y los miembros del Jurado Examinador puedan deliberar y calificar.

Al término de la deliberación, el Dr. Carlos Javier Solano Salinas invitó al tesista y a los asistentes a pasar al salón 304 para dar lectura a la evaluación de la sustentación. Obteniendo como resultado la calificación de:

<u>19</u>	<u>DIECINUEVE</u>	<u>EXCELENTE</u>
(NÚMERO)	(LETRAS)	(ESCALA)

A continuación, el presidente del Jurado Examinador entrega el Acta de Sustentación de Tesis a la Unidad de Posgrado, para continuar el trámite correspondiente para obtener el Grado Académico de Magíster Física con mención en Física Nuclear, del Ing. Nicolás Fernandez.

Siendo las 3:45 pm, se levantó la sesión.



UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS

Universidad del Perú. Decana de América

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

UNIDAD DE POSGRADO

Los miembros del Jurado Examinador suscriben el Acta de sustentación de tesis en la Ciudad de Lima, a los 9 días del mes de junio de 2023.

Acta de Sustentación de Tesis del Ingeniero Nicolás Fernandez

Dr. Carlos Javier Solano Salinas  
Presidente

Dr. Raúl Félix Carita Montero  
Miembro

Dr. Héctor Raúl Loro Ramírez  
Miembro externo

Dr. Teófilo Vargas Aucalla  
Asesor

CALIFICACIÓN OBTENIDA: *DECLINARE (19.) EXCELENTE*



Universidad Nacional Mayor de San Marcos  
Universidad del Perú. Decana de América  
Facultad de Ciencias Físicas  
UNIDAD DE POSGRADO

**CERTIFICADO DE SIMILITUD**

Yo, **Teófilo Vargas Auccalla**, en mi condición de asesor con el Dictamen N° 000089-2022-UPG-VDIP-FCF/UNMSM, de fecha 11 de noviembre de 2022, de la tesis de investigación, cuyo título es "**Geometría y descripción relativista de los grados de libertad electrónicos en el grafeno**", presentado por el Ingeniero **Nicolás Fernandez** para optar el grado de **Magíster en Física con mención en Física Nuclear**.

**CERTIFICO** que se ha cumplido con lo establecido en la Directiva de Originalidad y de Similitud de Trabajos Académicos, de Investigación y Producción Intelectual. Según la revisión, análisis y evaluación mediante el software de similitud textual, el documento evaluado cuenta con el porcentaje de **8%** de similitud, nivel **PERMITIDO** para continuar con los trámites correspondientes y para su **publicación en el repositorio institucional**.

Se emite el presente certificado en cumplimiento de lo establecido en las normas vigentes, como uno de los requisitos para la obtención del grado correspondiente.

Lima, 9 de agosto de 2023.

Firma del asesor

D.N.I. N°: 06532544

Nombres y apellidos del asesor: **Teófilo Vargas Auccalla**



# *Resumen*

## **Geometría y descripción relativista de los grados de libertad electrónicos en el grafeno**

La estructura de bandas del grafeno fue descrita por primera vez por Philip Russell Wallace en 1946 y recién en el año 2004 Novoselov y Geim lograron aislarlo en laboratorio.

La presencia de conos de Dirac en la estructura de bandas del grafeno hace posible la utilización de conceptos existentes en materia condensada en el estudio del comportamiento de los electrones y sus propiedades mediante la aplicación de la ecuación Dirac perteneciente a la física de partículas. Utilizando el método de enlaces fuertes, puede demostrarse que las excitaciones de baja energía del grafeno corresponden a fermiones de Dirac sin masa, lo que permite el estudio de algunas propiedades inusuales de la electrodinámica cuántica (QED).

A partir de un enfoque geométrico de los defectos en sólidos (dislocaciones y disclinations), se obtiene una métrica que corresponde a la de una singularidad cónica. Debido a que en el grafeno pueden existir tales defectos, se utiliza la ecuación de Dirac en espacio curvo para describir el comportamiento de los electrones en la geometría creada por dicha métrica. En el presente trabajo se resolvió la ecuación de Dirac sin masa mencionada, considerando el comportamiento de la función de onda en las cercanías del defecto; se obtuvo la densidad local de estados y, por último, se adoptó una condición de frontera de tipo billar de la cual se extrajo el espectro de baja energía del grafeno en presencia de dislocaciones de cuña, el cual presenta una dependencia en el módulo de Poisson de dicho material.

# *Agradecimientos*

Agradezco a mi familia especialmente a Agatha, a mi asesor de tesis Teófilo Vargas Auccalla, a mis co-asesores Pierre Pujol y Mario Florencio Solis Benitez y a todos los que hicieron posible este trabajo.

# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>I</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>II</b>
<b>Índice general</b>	<b>III</b>
<b>Índice de figuras</b>	<b>V</b>
<b>Índice de cuadros</b>	<b>VI</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Situación Problemática	1
1.2. Formulación del Problema	1
1.3. Justificación Teórica	2
1.4. Justificación Práctica	2
1.5. Objetivos	2
1.5.1. Objetivo General	2
1.5.2. Objetivo Específico	2
<b>2. Marco Teórico</b>	<b>3</b>
2.1. Antecedentes de la investigación	3
2.2. Bases Teóricas	4
2.2.1. Defectos en sólidos y su enfoque geométrico	4
2.2.1.1. Deformaciones elásticas	4
2.2.1.2. Dislocaciones	6
2.2.1.3. Defectos puntuales	10
2.2.1.4. Disclinaciones	12
2.2.1.5. Energía libre	14
2.2.1.6. Adopción del gauge	17
2.2.1.7. Dislocaciones paralelas en cuña	20
2.2.1.8. Dislocación de cuña en el enfoque geométrico	23
2.2.2. Introducción a la teoría del estado sólido	26
2.2.2.1. Red de Bravais	26
2.2.2.2. Redes infinitas y cristales finitos	27
2.2.2.3. Número de coordinación	27

2.2.2.4.	Celda unidad primitiva . . . . .	28
2.2.2.5.	Celda unidad convencional . . . . .	28
2.2.2.6.	Celda primitiva de Wigner-Sietz . . . . .	29
2.2.2.7.	Estructura cristalina, red con una base . . . . .	30
2.2.2.8.	Definición de red recíproca . . . . .	30
2.2.2.9.	Red recíproca es una red de Bravais . . . . .	31
2.2.2.10.	Primera zona de Brillouin . . . . .	32
2.2.2.11.	Potencial periódico . . . . .	32
2.2.2.12.	Teorema de Bloch . . . . .	34
2.2.2.13.	Demostración del teorema de Bloch . . . . .	34
2.2.2.14.	Condición de frontera de Born-Von Karman . . . . .	36
2.2.2.15.	Observaciones sobre el teorema de Bloch . . . . .	37
2.2.2.16.	Superficie de Fermi . . . . .	39
2.2.2.17.	Densidad de niveles . . . . .	40
2.2.2.18.	Método de enlaces fuertes . . . . .	42
2.2.2.19.	Funciones de Wannier . . . . .	46
2.2.3.	Método de enlaces fuertes en el grafeno . . . . .	48
2.2.3.1.	Breve introducción al grafeno . . . . .	48
2.2.3.2.	Estructura de bandas del grafeno en primera cuantización . . . . .	49
2.2.3.3.	Estructura de bandas del grafeno en segunda cuantización . . . . .	54
2.2.3.4.	Física de Dirac emergente . . . . .	55
2.2.4.	Ecuación de Dirac . . . . .	58
2.2.4.1.	Ecuación de Dirac en espacio plano . . . . .	58
2.2.4.2.	Forma covariante de la ecuación de Dirac . . . . .	62
2.2.4.3.	Ecuación de Dirac en espacio curvo . . . . .	63
2.2.4.4.	Gravedad por torsión y su acoplamiento con espinores . . . . .	71
2.2.5.	Condición de frontera de billar para partículas sin masa de espín semi-entero . . . . .	77
2.2.5.1.	Distribución de autovalores para billares con contorno circular . . . . .	80
<b>3.</b>	<b>Metodología</b>	<b>81</b>
<b>4.</b>	<b>Resultados y Discusión</b>	<b>82</b>
4.1.	Presentación de resultados . . . . .	82
4.1.1.	Establecimiento de la ecuación de Dirac . . . . .	82
4.1.2.	Resolución de la ecuación de Dirac . . . . .	85
4.1.3.	Restricciones, condiciones de frontera, densidad de estados y espectro de energía . . . . .	87
	<b>Bibliografía</b>	<b>93</b>

# Índice de figuras

2.1. Sólido con dislocaciones lineales: 2.1a Dislocación de borde con vector de Burgers perpendicular a la línea de dislocación; 2.1b Dislocación de tornillo con vector de Burgers paralelo a la línea de dislocación. . . . .	7
2.2. Dislocación de cuña con déficit de ángulo $\theta$ . Para $\theta$ positivo o negativo, la cuña es agregada o quitada respectivamente. . . . .	23
2.3. Red de Bravais bidimensional. Se muestran los vectores primitivos $\mathbf{a}_1$ y $\mathbf{a}_2$ . Los puntos de la red son una combinación lineal de estos con coeficientes enteros. . . . .	26
2.4. Celda unidad primitiva y convencional de una red de Bravais cúbica centrada en el cuerpo. La celda primitiva (sombreada) tiene la mitad del volumen de la celda convencional cúbica. . . . .	29
2.5. 2.5a Celda de Wigner-Sietz para una red de Bravais bidimensional.; 2.5b Celda de Wigner-Sietz para una red de Bravais cúbica centrada en el cuerpo. . . . .	29
2.6. Izquierda: Red de panal (honeycomb) del grafeno. Derecha: primera zona de Brillouin, los puntos de Dirac se encuentran en $\mathbf{K}$ y $\mathbf{K}'$ . . . . .	50
2.7. Funciones de onda planas incidentes y reflejadas en un dominio $D$ . . . . .	78

# Índice de cuadros

2.1. Correspondencia entre defectos y nociones geométricas . . . . .	14
--	----

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Situación Problemática

El grafeno constituye uno de los materiales más prometedores tanto a nivel teórico como práctico desde hace algunos años. Existen numerosos estudios realizados sobre este material y se han implementado múltiples desarrollos experimentales.

La principal motivación para el estudio del grafeno consiste en que las excitaciones de baja energía de los grados de libertad electrónicos presentan un comportamiento relativista como fermiones de Dirac sin masa.

El enfoque de este trabajo de investigación consiste en estudiar los posibles efectos que pueden tener los defectos topológicos en las propiedades electrónicas del grafeno.

### 1.2. Formulación del Problema

El presente trabajo consiste en estudiar las excitaciones de baja energía del grafeno en presencia de defectos topológicos aplicando la ecuación de Dirac en una geometría no trivial producida por dichos defectos.

### **1.3. Justificación Teórica**

La presencia de conos de Dirac en la estructura de bandas del grafeno hace posible la utilización de conceptos existentes en materia condensada en el estudio del comportamiento de los electrones y sus propiedades mediante la aplicación de la ecuación Dirac perteneciente a la física de partículas.

### **1.4. Justificación Práctica**

La existencia de conos de Dirac en el grafeno, hace que la conducción eléctrica pueda ser descrita por el movimiento de portadores de carga que imitan a partículas relativistas sin masa, volviéndolos más dispersivos. Esta característica del grafeno además de sus propiedades mecánicas, elásticas, electrónicas y ópticas, abren un universo de posibilidades tecnológicas.

### **1.5. Objetivos**

#### **1.5.1. Objetivo General**

El objetivo general de este trabajo reside en el estudio de los grados de libertad electrónicos del grafeno en presencia de defectos topológicos.

#### **1.5.2. Objetivo Específico**

Obtener el espectro de bajas energías con la presencia de dislocaciones en cuña en grafeno, obtenidas a partir de un enfoque geométrico que incluya propiedades elásticas del medio.

# Capítulo 2

## Marco Teórico

### 2.1. Antecedentes de la investigación

La estructura de bandas del grafeno fue descrita por primera vez por Philip Russell Wallace en 1946, quién mostró su inusual comportamiento semi-metálico (Wallace, 1947). En aquel momento no se creía que un material con una estructura completamente bidimensional fuera posible en la realidad y sus análisis sirvieron como un punto inicial en el estudio del grafito, material de gran importancia para los reactores nucleares luego de la segunda guerra mundial (Neto et al., 2009).

En el año 2004 se logró aislar al grafeno (Novoselov et al., 2004) luego de más de 400 años de su descubrimiento ya que, en primer lugar, nadie esperaba que este material pudiera existir en estado libre y, en segundo lugar, porque no existían arreglos experimentales que permitieran observar láminas de un átomo de espesor.

Uno de los aspectos más resaltantes del grafeno es que sus excitaciones de baja energía corresponden a fermiones de Dirac sin masa. Esta dispersión particular imita la física de la electrodinámica cuántica (QED) para fermiones sin masa pero a velocidades mucho menores que la de la luz. Por esta razón muchas de las propiedades inusuales de QED pueden observarse en el grafeno (Neto et al., 2006).

Existe un gran interés en tratar de estudiar cómo los defectos topológicos afectan la física de los electrones en el grafeno y su transporte, debido a que la presencia de los mismos es inevitable en los materiales (Bueno et al., 2012; Cortijo and Vozmediano, 2007, 2009; de Juan et al., 2010, 2007; De Juan et al., 2011; Furtado et al., 2006; Guinea et al., 2008; Vozmediano et al., 2008). Asimismo, al compartir el grafeno ciertas

propiedades de las membranas delgadas permite la descripción geométrica de sus defectos topológicos (cónicos), lo cual posibilita la descripción de fermiones de Dirac que se propagan en un espacio-tiempo localmente curvo, causa de su analogía con los problemas de gravedad cuántica (Arcos and Pereira, 2004; Carneiro et al., 2020; Furtado et al., 2006, 2008; Gonzalez et al., 1993; Katanaev, 2003, 2005, 2020; Katanaev and Mannanov, 2012a,b; Katanaev and Volovich, 1992, 1999; Mesaros et al., 2010; Osipov and Kochetov, 2001; Roberts and Wiseman, 2022; Ruggiero and Tartaglia, 2003; Sotiriou et al., 2011; Tod, 1994).

## 2.2. Bases Teóricas

### 2.2.1. Defectos en sólidos y su enfoque geométrico

#### 2.2.1.1. Deformaciones elásticas

Consideramos un cuerpo sólido tridimensional, elástico, continuo e infinito en el cual no actúan fuerzas externas. En la ausencia de defectos asumimos que existe un sistema de referencia Cartesiano  $x^i$ ,  $i = 1, 2, 3$ , en donde las propiedades elásticas del medio no-deformado poseen simetría traslacional y rotacional. Dicho estado se denomina estado base y es caracterizado por la métrica plana Euclidiana  $\delta_{ij} = \text{diag}(+ + +)$ . En general, la métrica define el producto escalar de los vectores tangentes en cada punto de la variedad base. En el espacio Euclidiano uno puede identificar espacios vectoriales tangentes en cada punto consigo mismos y con la variedad base.

Las propiedades elásticas del medio pueden describirse con el campo vectorial de desplazamiento  $u^i(x)$  el cual corresponde al corrimiento de un punto desde su posición inicial en el estado base. Es decir, después de la deformación, el punto  $x^i$  tendrá coordenadas  $y^i = x^i + u^i(x)$  en el sistema de referencia Cartesiano inicial. Las ecuaciones estáticas básicas de la teoría de la elasticidad de pequeñas deformaciones son

$$\partial_i \sigma^{ij} + f^j = 0, \quad (2.2.1)$$

$$\sigma^{ij} = \lambda \delta^{ij} \varepsilon_k^k + 2\mu \varepsilon^{ij}, \quad (2.2.2)$$

donde  $\sigma^{ij}$  es el tensor de esfuerzos y  $\varepsilon_{ij} = 1/2(\partial_i u_j + \partial_j u_i)$  es el tensor de deformaciones.  $\lambda$  y  $\mu$  son los módulos elásticos (Coeficientes de Lamé).  $f^j(x)$  describe las

fuerzas inelásticas distribuidas dentro del cuerpo y, en adelante, se igualarán a cero. La ecuación 2.2.1 es la segunda ley de Newton, mientras que 2.2.2 es la ley de Hook que relaciona esfuerzos y deformaciones.

El problema clásico en la teoría estática de la elasticidad es encontrar la solución a las ecuaciones 2.2.1 y 2.2.2 en el cuerpo sólido dadas unas condiciones de contorno y unas fuerzas internas. Numerosas soluciones a este problema se encuentran en buen acuerdo con los experimentos, por lo que, uno podría decir que estas ecuaciones tienen un firme trasfondo experimental y que el observable real físico es el campo de desplazamiento.

Veamos cómo las deformaciones elásticas del medio se pueden describir con la ayuda de la geometría Riemanniana. Desde el punto de vista matemático, las deformaciones del medio son descritas mediante difeomorfismos  $x^i \rightarrow y^i(x)$  en una variedad  $\mathbb{R}^3$ . Este difeomorfismo transforma la métrica Euclidiana inicial en la métrica

$$g_{ij}(x) = \frac{\partial x^k}{\partial y^i} \frac{\partial x^l}{\partial y^j} \delta_{kl} \approx \delta_{ij} - \partial_i u_j - \partial_j u_i = \delta_{ij} - 2\varepsilon_{ij} \quad (2.2.3)$$

la cual está escrita en el sistema de referencia Cartesiano inicial. La última igualdad sólo es válida para pequeñas deformaciones.

La métrica 2.2.3 define en cada punto el producto escalar de los vectores tangentes. Ahora los espacios tangentes como espacios métricos no pueden ser identificados consigo mismos, por lo tanto, la noción de un sistema de referencia Cartesiano puede relacionarse solamente con un observador externo.

En geometría Riemanniana la métrica define la conexión de Levi-Civita (Símbolos de Christoffel) de manera única

$$\overset{\circ}{\Gamma}_{ijk}(x) = \overset{\circ}{\Gamma}_{ij}{}^l g_{lk} = \frac{1}{2}(\partial_i g_{jk} + \partial_j g_{ik} - \partial_k g_{ij}), \quad (2.2.4)$$

y el correspondiente tensor de curvatura,

$$\overset{\circ}{R}_{ijk}{}^l(x) = \partial_i \overset{\circ}{\Gamma}_{jk}{}^l + \overset{\circ}{\Gamma}_{im}{}^l \overset{\circ}{\Gamma}_{jk}{}^m - (i \leftrightarrow j). \quad (2.2.5)$$

Aquí el círculo  $\circ$  se refiere a las cantidades en la geometría Riemanniana donde el tensor de torsión es idénticamente cero. El tensor de curvatura de la métrica 2.2.3 del medio deformado es obviamente cero ya que es cero en el medio no-deformado y transforma covariantemente bajo difeomorfismos.

Podemos destacar que una métrica no trivial en el sistema de referencia Cartesiano es una realidad física debido a las tensiones que se producen en el medio aunque el tensor de curvatura sea idénticamente cero. Además, las ondas elásticas que se propagan por las líneas geodésicas no se propagarán a en líneas rectas desde el punto de vista del observador externo ya que las geodésicas en métricas no triviales son curvas.

Supongamos que el medio está provisto con una métrica de curvatura cero, ¿qué sucede con el campo de desplazamientos? Hagamos que las componentes de la métrica estén dadas en el sistema de referencia Cartesiano el cual está definido salvo por traslaciones y rotaciones globales. En este caso el campo de desplazamiento está definido por 2.2.3. Es conocido que la ecuación de cero curvatura corresponde a la condición de integrabilidad para la ecuación diferencial 2.2.3 no necesariamente para pequeños  $u^i$ . Para un campo de desplazamientos pequeño la ecuación de curvatura cero se reduce a la bien conocida condición de integrabilidad de Saint-Venant.

Como hemos visto, un medio elásticamente deformado no es más que una variedad de curvatura y torsión cero con un sistema de referencia Cartesiano privilegiado definido por las simetrías del estado base. Esto solo aplica a sólidos perfectamente homogéneos e isotrópicos. Cualquier sólido real posee numerosos defectos que definen todas las propiedades de grandes deformaciones. En las próximas secciones mostraremos que un medio con defectos puede ser descrito adecuadamente como una variedad con curvatura y torsión no triviales.

### 2.2.1.2. Dislocaciones

Supongamos una curva cerrada o infinita sin auto-interacciones y cuyos extremos terminan en un cuerpo ideal en su estado base. Se corta al cuerpo a lo largo de cualquier superficie con dicha curva como contorno. Movemos el medio de manera arbitraria en ambos lados de la superficie y se pegan los lados extrayendo o añadiendo material si es necesario. De manera general, el medio no se encontrará en equilibrio a causa de las deformaciones elásticas pero en su debido tiempo alcanzará un estado estático en donde la posición de la superficie y su contorno será diferente. De este modo, se obtiene un defecto lineal denominado dislocación.

Se muestran algunos ejemplos de dislocaciones en la Figura 1. El cuerpo es cortado a la mitad por el plano  $x^3 = 0$ ,  $x^2 > 0$ . Luego la parte superior del medio se desplaza por

un vector  $\mathbf{b}$  hacia la línea de dislocación  $x^2 = x^3 = 0$  y ambos lados de la superficie de corte se pegan. El vector  $\mathbf{b}$  se denomina vector de Burgers. De esta manera uno obtiene una dislocación lineal llamada dislocación de borde (Edge dislocation), ver Figura 2.1a. Si el vector de Burgers fuera paralelo a la línea de dislocación, Figura 2.1b, se denominaría a tal defecto como dislocación de tornillo. Por otro lado, si el vector de Burgers fuera perpendicular a la superficie de corte habría que agregar o quitar medio antes de pegar el contorno del cuerpo. Podemos ver que las características esenciales de la dislocación son la línea de dislocación y el vector de Burgers, pero no la superficie de corte. El medio con o sin dislocación cubre todo  $\mathbb{R}^3$ . La diferencia

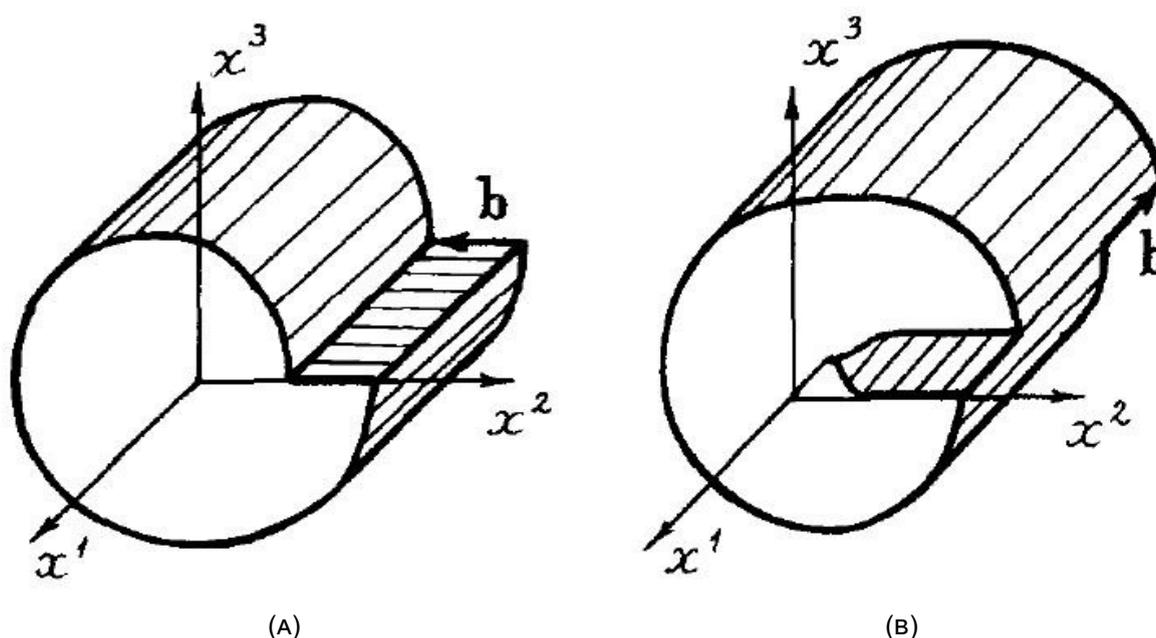


FIGURA 2.1: Sólido con dislocaciones lineales: 2.1a Dislocación de borde con vector de Burgers perpendicular a la línea de dislocación; 2.1b Dislocación de tornillo con vector de Burgers paralelo a la línea de dislocación.

entre deformaciones elásticas y las dislocaciones es que en estas últimas el campo de desplazamiento no es una función suave y no representa un difeomorfismo. Incluso el dominio de  $y^i$  difiere de  $\mathbb{R}^3$  si se agrega o quita medio al cuerpo en el proceso de creación del defecto. Para describir un medio con dislocaciones debemos introducir un sistema de coordenadas curvilíneo arbitrario  $x^\mu$ ,  $\mu = 1, 2, 3$  (no existe un sistema de referencia privilegiado), y asumimos que el campo de desplazamiento es nulo en los puntos correspondientes al medio agregado. El vector de Burgers puede ser expresado en función del campo de desplazamiento

$$\oint_C dx^\mu \partial_\mu u^i(x) = \oint_C dx^\mu \partial_\mu y^i(x) = -b^i, \quad (2.2.6)$$

donde  $C$  es una curva cerrada que rodea la línea de dislocación. Esta integral es invariante bajo cambio de coordenadas  $x^\mu \rightarrow x^{\mu'}(x)$ , traslaciones globales y rotaciones  $SO(3)$  de  $y^i$ . De aquí en adelante, distinguiremos los índices del sistema de referencia Cartesiano inicial fijo por las letras  $i, j, k, l$ , mientras que los índices del sistema de coordenadas arbitrario serán identificados por las letras  $\mu, \nu, \dots$ , ya que no existe un sistema de referencia privilegiado en un medio con dislocaciones.

Mientras que el vector de Burgers y otras cantidades físicas pueden ser calculadas en un sistema de coordenadas arbitrario, las componentes del campo de desplazamiento están referidas naturalmente al marco de referencia Cartesiano inicial. En el caso contrario, la integral 2.2.6 no es invariante bajo cambios de coordenadas generales. Entonces podemos pensar que la distinción entre el marco de referencia Cartesiano y el sistema de coordenadas arbitrario tiene significado físico.

Como se comentó previamente el campo de desplazamiento no es una función suave en todos lados en un medio con dislocaciones. Podemos asumir que las derivadas parciales  $\partial_\mu y^i$  son suaves en todos lados debido a que solamente en esta situación los esfuerzos estarán definidos en cada punto de manera única (ver ecuación 2.2.1). Entonces para describir dislocaciones en vez de  $\partial_\mu y^i$  introducimos un campo tensorial suave  $e_\mu^i(x)$ . Además, en ausencia de dislocaciones, asumimos que el  $\det e_\mu^i \neq 0$  en todos lados.

El criterio para la existencia de dislocaciones se da cuando se rompe la condición de integrabilidad para  $y^i$  en la ecuación  $\partial_\mu y^i = e_\mu^i$ . En el sistema de coordenadas fijo tiene la forma

$$\partial_\mu e_\nu^i - \partial_\nu e_\mu^i \neq 0. \quad (2.2.7)$$

El vector de Burgers es igual a la integral

$$\oint_C dx^\mu \partial_\mu e_\mu^i = \iint_S dx^\mu \wedge dx^\nu (\partial_\mu e_\nu^i - \partial_\nu e_\mu^i) = -b^i, \quad (2.2.8)$$

donde  $S$  es una superficie suave con contorno  $C$  y  $dx^\mu \wedge dx^\nu$  es el elemento de superficie.

Hasta aquí hemos discutido sobre una única dislocación de configuración geométrica simple. En el caso real de que existan muchas dislocaciones y de cualquier configuración, asumiremos que el tratamiento matemático adecuado es considerar distribuciones continuas de dislocaciones descritas en una geometría de Riemann-Cartan.

Identificamos entonces el campo  $e_\mu^i$  con el vielbein que define la métrica Riemanniana en un medio con dislocaciones

$$g_{\mu\nu} = e_\mu^i e_\nu^j \delta_{ij}. \quad (2.2.9)$$

De esta forma el medio se convierte en una variedad Riemanniana con una métrica no trivial.

Entonces la distribución de dislocaciones en un medio está descrita por el vielbein  $e_\mu^i$ , el cual define en cualquier punto la transición entre la base coordenada en el espacio tangente  $\{\partial_\mu\}$  y una base ortonormal  $\{e_i\}$ ,  $\partial_\mu e_\nu^i e_i$ . De hecho, espacios tangentes en distintos puntos son diferentes, y es natural requerir invariancia local  $SO(3)$ . Para esto introducimos la conexión  $SO(3)$   $\omega_\mu^{ij} = -\omega_\mu^{ji}$  que define el transporte paralelo de vectores  $v^i e_i$  en una base ortonormal. La correspondiente derivada covariante viene dada por la siguiente expresión

$$\nabla_\mu v^i = \partial_\mu v^i + \omega_\mu^i{}_j v^j. \quad (2.2.10)$$

La conexión lineal  $\Gamma_{\mu\nu}^\lambda(x)$  puede ser introducida mediante la relación

$$\nabla_\mu e_\nu^i = \partial_\mu e_\nu^i - \Gamma_{\mu\nu}^\rho e_\rho^i + \omega_\mu^i{}_j e_\nu^j. \quad (2.2.11)$$

de la cual uno puede deducir fácilmente la condición de metricidad

$$\nabla_\mu g_{\nu\rho} = \partial_\mu g_{\nu\rho} - \Gamma_{\mu\nu}^\lambda g_{\lambda\rho} - \Gamma_{\mu\rho}^\lambda g_{\nu\lambda}. \quad (2.2.12)$$

La ecuación 2.2.11 define de manera única la conexión lineal en términos de la conexión  $SO(3)$  y el vielbein, mientras que la ecuación 2.2.12 define la conexión lineal en términos de la métrica salvo un tensor de torsión  $T_{\mu\nu}^\rho = -T_{\nu\mu}^\rho = \Gamma_{\mu\nu}^\rho - \Gamma_{\nu\mu}^\rho$

$$\Gamma_{\mu\nu\rho} = \Gamma_{\mu\nu}^\lambda g_{\lambda\rho} = \overset{\circ}{\Gamma}_{\mu\nu\rho} + \frac{1}{2}(T_{\mu\nu\rho} + T_{\rho\mu\nu} - T_{\nu\rho\mu}), \quad (2.2.13)$$

donde los símbolos de Christoffel  $\overset{\circ}{\Gamma}_{\mu\nu\rho}$  están definidos solo por la métrica 2.2.4, mientras que el tensor de torsión es arbitrario. En términos del vielbein y de la conexión  $SO(3)$ , la cual será considerada como una variable independiente, curvatura y torsión tiene la forma

$$R_{\mu\nu}^{ij} = \partial_\mu \omega_\nu^{ij} - \omega_\mu^{ik} \omega_{\nu k}^j - (\mu \leftrightarrow \nu), \quad (2.2.14)$$

$$T_{\mu\nu}^i = \partial_\mu e_\nu^i - \omega_\mu^{ij} e_{\nu j} - (\mu \leftrightarrow \nu). \quad (2.2.15)$$

La transición entre índices planos  $i, j, k, l$  e índices curvos  $\mu, \nu, \dots$  se realiza usando el campo de vielbein. Los índices  $i, j, k, l$  y  $\mu, \nu, \dots$  se suben y bajan con la métrica

Euclidiana  $\delta_{ij}$  y la métrica  $g_{\mu\nu}$  respectivamente. El tensor de curvatura en términos de la conexión lineal 2.2.13 tiene la misma forma que 2.2.5. Así, hemos definido una geometría de Riemann-Cartan en un medio con dislocaciones.

Podemos generalizar la noción del vector de Burgers. El criterio para la existencia de dislocaciones 2.2.7 no es invariante bajo rotaciones  $SO(3)$  locales. El vector de Burgers está dado por la integral

$$\iint_S dx^\mu \wedge dx^\nu T_{\mu\nu}{}^i = -b^i. \quad (2.2.16)$$

Si la curvatura es nula entonces la conexión  $SO(3)$  es un gauge puro y uno puede siempre hacer una rotación  $SO(3)$  local para obtener  $\omega_\mu{}^{ij} = 0$ . Así, identificando la base ortonormal en diferentes puntos obtenemos las coordenadas en las cuales la integral de superficie de la torsión 2.2.16 se reduce a la integral a lo largo de su contorno. En este caso el vector de Burgers no depende de la superficie encerrada por un contorno dado.

La ecuación 2.2.16 tiene algunos inconvenientes. Primero, la integral no es invariante bajo rotaciones locales. Segundo, depende no solo del contorno sino también de la superficie misma. Por lo tanto, en un medio con dislocaciones distribuidas continuamente, el vector de Burgers puede ser definido únicamente de manera local en una superficie infinitesimal por el tensor de torsión

$$dx^\mu \wedge dx^\nu T_{\mu\nu}{}^i = -db^i(x). \quad (2.2.17)$$

Esta ecuación brinda una interpretación al tensor de torsión el cual no es más que la densidad superficial del vector de Burgers.

### 2.2.1.3. Defectos puntuales

Además de los defectos lineales considerados en la sección anterior existen defectos puntuales en los sólidos denominados vacancias e impurezas. Estos también pueden ser considerados en términos del campo de desplazamiento y en términos de la geometría de Riemann-Cartan.

Las vacancias en medios continuos elásticos pueden pensarse como cortar una esfera en el medio, remover el material en su interior y reducir dicha esfera a un punto. Una impureza puede imaginarse en el orden inverso y agregando materia al medio. Puede verse que la integral 2.2.6 para un defecto puntual sobre una curva cerrada

que no pase por el centro del defecto será nula, mientras que la integral del campo de desplazamiento sobre una superficie rodeando al defecto puntual será no nula.

Probaremos que la integral del campo de desplazamiento sobre una superficie rodeando un defecto puntual con simetría esférica no depende de la superficie.

$$M = \iint_S dx^i \wedge dx^j \varepsilon_{ijk} u^k \quad (2.2.18)$$

Esta integral no puede ser transformada a una integral de volumen de la divergencia  $\partial_i u^i$  sobre el interior de la superficie debido a que el campo de desplazamiento no se encuentra bien definido en todos lados. Pero la diferente entre dos integrales sobre dos superficies distintas puede ser escrita como una integral de volumen

$$\iiint_V d^3x \partial_i u^i, \quad (2.2.19)$$

donde  $V$  es el volumen entre las superficies que se supone no se intersecta uno con el otro.

En equilibrio, las ecuaciones 2.2.1 y 2.2.2 adquieren la forma

$$\partial_i [(\lambda + \mu) \partial^j u^i + \mu \partial^i u^j] = 0. \quad (2.2.20)$$

Para una solución con simetría esférica  $\partial^i u_j - \partial^j u_i = 0$ , y se obtiene la ecuación  $\partial_j \partial_i u^i = 0$ . Así, la integral 2.2.19 sobre un dominio fuera del defecto es cero. Esto prueba que la integral 2.2.18 no depende de la superficie y se denominará "masa" del defecto puntual. La masa es positiva para una impureza y negativa para una vacancia.

Una forma alternativa de definir un defecto puntual ubicado en el origen del sistema de coordenadas puede realizarse con la función  $\delta$  del lado derecho de la ecuación 2.2.1.

$$\frac{\lambda + 2\mu}{\lambda + \mu} M \partial_j \delta(x) \quad (2.2.21)$$

La noción de masa de un defecto puntual puede generalizarse en términos de la geometría de Riemann-Cartan. Definimos

$$M = \iiint d^3x (\det e_\mu^i - 1) \quad (2.2.22)$$

ya que para pequeñas deformaciones  $\det e_\mu^i \approx \det(\delta_\mu^i + \partial_\mu u^i) \approx 1 + \partial_i u^i$ . Entonces la masa de un defecto puntual es el cambio de volumen del medio luego de la creación del defecto.

Podemos notar que los defectos puntuales pueden ser considerados como el caso extremo de una dislocación lineal. De hecho, hagamos que la línea de dislocación sea un círculo. Luego quitamos una bola teniendo este círculo como ecuador y pegamos las semiesferas juntas dejando el ecuador inmóvil. En este caso obtenemos una dislocación circular la cual se reduce a un defecto puntual cuando el radio del círculo tiende a cero. Ambos, dislocaciones y defectos puntuales están definidos por el vielbein.

#### 2.2.1.4. Disclinaciones

Hasta aquí hemos descrito dislocaciones y defectos puntuales los cuales están asociados con un tensor de torsión no nulo en el medio. Ahora veremos que la presencia de curvatura describe otro defecto denominado disclinaciones que ocurren en sólidos que presentan estructura de spin.

Consideremos  $n^i(x)$  como un campo vectorial que caracteriza los grados de libertad rotacionales del medio. Fijemos la dirección del medio denotada por  $n^i_0$ . Luego la dirección  $n^i(x)$  puede describirse por el ángulo de rotación  $\omega^{ij}(x) \in SO(3)$ ,  $\omega^{ij} = -\omega^{ji}$  como sigue

$$n^i = S^i_j(\omega)n^j_0, \quad (2.2.23)$$

donde  $S^i_j$  es la matriz de la correspondiente representación. Utilizaremos la parametrización de  $SO(3)$  en la cual la dirección del pseudovector  $\theta_i = \varepsilon_{ijk}\omega^{jk}$  (donde  $\varepsilon_{ijk}$  es el tensor anti-simétrico,  $\varepsilon_{123} = 1$ ) coincide con el eje de rotación y su módulo es igual al ángulo de rotación.

La integral alrededor de cualquier curva cerrada  $C$  rodeando el eje de la disclinación

$$\oint_C dx^\mu \partial_\nu \omega^{ij} = \Omega^{ij} \quad (2.2.24)$$

devuelve el ángulo de rotación total de  $n^i$ . El vector

$$\Theta_i = \varepsilon_{ijk}\Omega^{jk} \quad (2.2.25)$$

se denomina vector de Frank. Bajo una rotación la longitud de  $n^i$  permanece constante y entonces la rotación puede ser parametrizada por un punto en una esfera unitaria.

Analizaremos, al igual que antes, el caso de disclinaciones continuamente distribuidas. Al igual que el campo de desplazamiento, el campo  $\omega^{ij}$  no es continuo en el medio con disclinaciones. De todos modos podemos asumir que la derivada  $\partial_\mu \omega_\nu^{ij} \rightarrow \omega_\mu^{ij}$  es un campo suave. Luego el vector de Frank vale

$$\Omega^{ij} = dx^\mu \omega_\mu^{ij} = \int_S dx^\mu \wedge dx^\nu (\partial_\mu \omega_\nu^{ij} - \partial_\nu \omega_\mu^{ij}), \quad (2.2.26)$$

donde  $S$  es cualquier superficie con contorno  $C$ . Dado el campo  $\omega_\mu^{ij}$  entonces la condición de integrabilidad para  $\omega^{ij}$

$$\partial_\mu \omega_\nu^{ij} - \partial_\nu \omega_\mu^{ij} = 0, \quad (2.2.27)$$

brinda el criterio para la ausencia de disclinaciones.

Consideremos un medio con disclinaciones continuamente distribuidas. Identificamos al campo  $\omega_\mu^{ij}$  con la conexión  $SO(3)$ . Luego la condición para la ausencia de disclinaciones 2.2.27 debe ser reemplazada por la condición de curvatura cero

$$R_{\mu\nu}{}^{ij} = 0. \quad (2.2.28)$$

Para cualquier superficie  $S$  el vector de Frank puede escribirse como

$$\Omega^{ij} = \int_S dx^\mu \wedge dx^\nu R_{\mu\nu}{}^{ij}. \quad (2.2.29)$$

Esta definición coincide con 2.2.26 para una disclinación axial cuando  $S$  es perpendicular a la línea de disclinación debido a que los términos cuadráticos de la curvatura desaparecen.

Para disclinaciones continuamente distribuidas la integral 2.2.29 no es invariante bajo rotaciones locales y depende no solo del contorno sino de la superficie. Entonces en un medio con disclinaciones continuamente distribuidas el vector de Frank puede ser definido únicamente de manera local en una superficie infinitesimal por el tensor de curvatura

$$d\Omega^{ij} = dx^\mu \wedge dx^\nu R_{\mu\nu}{}^{ij}. \quad (2.2.30)$$

Esta relación brinda interpretación física a la curvatura como la densidad superficial del vector de Frank.

De esta forma describimos un medio con disclinaciones continuamente distribuidas en términos de la geometría de Riemann-Cartan. En modo de resumen escribimos en la

Tabla 2.1 la correspondencia entre las nociones geométricas y los defectos.

Deformaciones elásticas	$R_{\mu\nu}{}^{ij} = 0$	$T_{\mu\nu}{}^i = 0$
Dislocaciones	$R_{\mu\nu}{}^{ij} = 0$	$T_{\mu\nu}{}^i \neq 0$
Disclinaciones	$R_{\mu\nu}{}^{ij} \neq 0$	$T_{\mu\nu}{}^i = 0$
Dislocaciones y disclinaciones	$R_{\mu\nu}{}^{ij} \neq 0$	$T_{\mu\nu}{}^i \neq 0$

CUADRO 2.1: Correspondencia entre defectos y nociones geométricas

### 2.2.1.5. Energía libre

Para completar nuestra discusión consideramos la posibilidad de elegir un Lagrangiano geométrico que nos otorgue las ecuaciones de equilibrio para el medio con dislocaciones y disclinaciones. Utilizaremos el Lagrangiano de ocho parámetros más general cuadráticos en curvatura y en torsión. Existen tres invariantes cuadráticos independientes en el tensor de torsión y tres invariantes cuadráticos independientes en el tensor de curvatura en tres dimensiones. Es posible agregar la curvatura escalar y una constante “cosmológica”  $\Lambda$ . Dicho Lagrangiano viene dado por la expresión

$$\begin{aligned} \frac{1}{e} \mathcal{L} = & -\varkappa R + \frac{1}{4} T_{ijk} (\beta_1 T^{ijk} + \beta_2 T^{kij} + \beta_3 T^i \delta^{jk}) \\ & + \frac{1}{4} R_{ijkl} (\gamma_1 R^{ijkl} + \gamma_2 R^{klij} + \gamma_3 R^{ik} \delta^{jl}) - \Lambda, \quad e = \det e_\mu{}^i, \end{aligned} \quad (2.2.31)$$

donde  $\varkappa$ ,  $\beta_{1,2,3}$ , y  $\gamma_{1,2,3}$  son constantes. Requeriremos que las ecuaciones de equilibrio permitan tres tipo de soluciones:

1. Soluciones que describan el medio solo con dislocaciones,  $R_{\mu\nu}{}^{ij} = 0$ ,  $T_{\mu\nu}{}^i \neq 0$ .
2. Soluciones que describan el medio solo con disclinaciones,  $R_{\mu\nu}{}^{ij} \neq 0$ ,  $T_{\mu\nu}{}^i = 0$ .
3. Soluciones que describan el medio sin dislocaciones ni disclinaciones,  $R_{\mu\nu}{}^{ij} = 0$ ,  $T_{\mu\nu}{}^i = 0$ .

Al tener en cuenta estas asunciones se reduce el número de parámetros a dos. El Lagrangiano 2.2.31 otorga las siguientes ecuaciones de equilibrio

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{e} \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta e^\mu_i} = & \varkappa (R e^\mu_i - 2R_i^\mu) + \beta_1 \left( \nabla_\nu T^{\nu\mu}_i - \frac{1}{4} T_{jkl} T^{jkl} e^\mu_i + T^{\mu jk} T_{ijk} \right) \\
 & + \beta_2 \left( -\frac{1}{2} \nabla_\nu (T_i^{\mu\nu} - T_i^{\nu\mu}) - \frac{1}{4} T_{jkl} T^{ljk} e^\mu_i - \frac{1}{2} T^{j\mu k} T_{kij} + \frac{1}{2} T^{jk\mu} T_{kij} \right) \\
 & + \beta_3 \left( -\frac{1}{2} \nabla_\nu (T^\nu e^\mu_i - T^\mu e^\nu_i) - \frac{1}{4} T_j T^j e^\mu_i + \frac{1}{2} T^\mu T_i + \frac{1}{2} T^j T_{ij}^\mu \right) \\
 & + \gamma_1 \left( -\frac{1}{4} R_{jklm} R^{jklm} e^\mu_i + R^{\mu jkl} R_{ijkl} \right) + \gamma_2 \left( -\frac{1}{4} R_{jklm} R^{lmjk} e^\mu_i + R^{kl\mu j} R_{ijkl} \right) \\
 & + \gamma_3 \left( -\frac{1}{4} R_{jk} R^{jk} e^\mu_i + \frac{1}{2} R^{\mu j} R_{ij} + \frac{1}{2} R^{jk} R_{jik}^\mu \right) + \Lambda e^\mu_i = 0,
 \end{aligned} \tag{2.2.32}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{e} \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \omega_\mu^{ij}} = & \varkappa \left( \frac{1}{2} T_{ij}^\mu + T_i e^\mu_j \right) + \beta_1 \frac{1}{2} T^\mu_{ji} + \beta_2 \frac{1}{4} (T_i^\mu_j - T_{ij}^\mu) + \beta_3 \frac{1}{4} T_j e^\mu_i \\
 & + \gamma_1 \frac{1}{2} \nabla_\nu R^{\nu\mu}_{ij} + \gamma_2 \frac{1}{2} \nabla_\nu R_{ij}^{\nu\mu} + \gamma_3 \frac{1}{4} \nabla_\nu (R^\nu_i e^\mu_j - R^\mu_i e^\nu_j) - (i \leftrightarrow j) = 0,
 \end{aligned} \tag{2.2.33}$$

donde la derivada covariante actúa con la conexión  $SO(3)$  sobre los índices latinos y con los símbolos de Christoffel sobre los índices griegos.

La primera condición de los tipos de soluciones para las ecuaciones de equilibrio es que en el medio existan solamente dislocaciones. Esto implica que el tensor de curvatura es cero correspondiente con la ausencia de disclinaciones. Substituyendo la condición  $R_{\mu\nu}{}^{ij} = 0$  en la ecuación 2.2.33 se obtiene

$$\begin{aligned}
 (12\varkappa + 2\beta_1 - \beta_2 - 2\beta_3) T_i &= 0, \\
 (\varkappa - \beta_1 - \beta_2) T^* &= 0, \\
 (4\varkappa + 2\beta_1 - \beta_2) W_{ijk} &= 0.
 \end{aligned} \tag{2.2.34}$$

$T_i$ ,  $T^*$  y  $W_{ijk}$  son las componentes irreducibles del tensor de torsión,

$$T_{ijk} = W_{ijk} + T^* \varepsilon_{ijk} + \frac{1}{2} (\delta_{ik} T_j - \delta_{jk} T_i), \tag{2.2.35}$$

donde

$$\begin{aligned} T^* &= \frac{1}{6} T_{ijk} \varepsilon^{ijk}, \quad T_j = T_{ij}{}^i, \\ W_{ijk} &= T_{ijk} - T^* \varepsilon_{ijk} - \frac{1}{2} (\delta_{ik} T_j - \delta_{jk} T_i), \\ W_{ijk} \varepsilon^{ijk} &= 0, \quad W_{ij}{}^i = 0. \end{aligned} \quad (2.2.36)$$

En el caso general de dislocaciones, todas las componentes irreducibles del tensor de torsión son distintas de cero y las ecuaciones 2.2.34 tienen solución única

$$\beta_1 = -\varkappa, \quad \beta_2 = 2\varkappa, \quad \beta_3 = 4\varkappa. \quad (2.2.37)$$

Con estos valores la ecuación 2.2.32 se reduce a las ecuaciones de Einstein con constante cosmológica

$$\overset{\circ}{R}_{\mu\nu} - \frac{1}{2} g_{\mu\nu} \overset{\circ}{R} - \frac{\Lambda}{2\varkappa} g_{\mu\nu} = 0. \quad (2.2.38)$$

De esta forma queda satisfecha la primera condición.

De acuerdo a la segunda condición, las ecuaciones de equilibrio deben proporcionar soluciones con torsión nula  $T_{\mu\nu}{}^i = 0$ . En este caso el tensor curvatura tiene la simetría adicional  $R_{ijkl} = R_{klij}$ , y la ecuación 2.2.33 se vuelve

$$\begin{aligned} &\left( \gamma_1 + \gamma_2 + \frac{1}{4} \gamma_3 \right) \nabla_\nu \left( R^{S\nu}{}_i e^\mu{}_j - R^{S\mu}{}_i e^\nu{}_j - R^{S\nu}{}_j e^\mu{}_i + R^{S\mu}{}_j e^\nu{}_i \right) \\ &+ \frac{1}{6} (\gamma_1 + \gamma_2 + 4\gamma_3) (e^\nu{}_i e^\mu{}_j - e^\mu{}_i e^\nu{}_j) \nabla_\nu R = 0. \end{aligned} \quad (2.2.39)$$

Aquí, descomponemos el tensor de Ricci en sus componentes irreducibles

$$R_{ij} = R^S{}_{ij} + R^A{}_{ij} + \frac{1}{3} R \delta_{ij}, \quad (2.2.40)$$

donde

$$R^S{}_{ij} = R^S{}_{ji}, \quad R^{S i}{}_i = 0, \quad R^A{}_{ij} = -R^A{}_{ji}. \quad (2.2.41)$$

Nos damos cuenta que para torsión cero, el tensor de Ricci es simétrico:  $R^A{}_{ij} = 0$ . La contracción de la ecuación 2.2.39 con  $e_\mu{}^j$  brinda la siguiente ecuación

$$\left( \gamma_1 + \gamma_2 + \frac{1}{4} \gamma_3 \right) \nabla_\nu R^{S\nu}{}_i + \frac{1}{3} (\gamma_1 + \gamma_2 + 4\gamma_3) \nabla_\mu R = 0. \quad (2.2.42)$$

En el caso general en que la curvatura no se anule, las derivadas covariantes  $R^{S\nu}{}_\mu$  y

$\nabla_\mu R$  son distintas de cero e independientes. De esta forma, obtenemos dos ecuaciones para las constantes,

$$\gamma_1 + \gamma_2 + \frac{1}{4}\gamma_3 = 0, \quad \gamma_1 + \gamma_2 + 4\gamma_3 = 0, \quad (2.2.43)$$

las cuales tienen una única solución

$$\gamma_1 = -\gamma_2 = \gamma, \quad \gamma_3 = 0. \quad (2.2.44)$$

En este caso, la ecuación 2.2.32 correspondiente a torsión cero también se reduce a las ecuaciones de Einstein 2.2.38.

La última condición para la existencia de soluciones sin curvatura y sin torsión, es satisfecha para constante cosmológica cero  $\Lambda = 0$ . Por lo tanto, el Lagrangiano más simple y con sentido físico requiere de dos parámetros,

$$\frac{1}{e}\mathcal{L} = -\kappa\overset{\circ}{R} + 2\gamma R^A{}_{ij}R^{Aij}, \quad (2.2.45)$$

que es la suma del Lagrangiano de Einstein-Hilbert para el vielbein y el cuadrado de la parte anti-simétrica del tensor de Ricci. Debe notarse que  $\overset{\circ}{R}(e)$  y  $R^A{}_{ij}$  están construidos por distintas conexiones métricas.

### 2.2.1.6. Adopción del gauge

En nuestro enfoque geométrico, el vielbein  $e_\mu{}^i$  y la conexión  $SO(3)$   $\omega_{\mu i}{}^j$  son las únicas variables. El campo de desplazamiento  $u^i$  y la estructura de spin  $\omega_i{}^j$  pueden ser introducidas únicamente en aquellas regiones donde no existan defectos. Como consecuencia de la ausencia de disclinaciones  $R_{\mu\nu i}{}^j = 0$ , la conexión  $SO(3)$  es un gauge puro y, por lo tanto, la estructura de spin  $\omega_i{}^j$  existe. Si, además, no existen dislocaciones  $T_{\mu\nu}{}^i = 0$ , entonces el campo de desplazamiento es tal que sus derivadas parciales son iguales al vielbein. Solo en este caso podemos introducir el campo de desplazamiento y la estructura de spin.

Para la energía libre 2.2.45, las ecuaciones de Euler-Lagrange son covariantes bajo transformaciones generales de coordenadas  $\mathbb{R}^3$  y rotaciones locales  $SO(3)$ . Esto significa que toda solución de las ecuaciones de equilibrio está definida salvo difeomorfismos y rotaciones locales. Para que la teoría geométrica de los defectos pueda hacer predicciones, tenemos que adoptar un sistema de coordenadas (adoptar un gauge).

Luego de eso, podemos decir que la solución de las ecuaciones de Euler-Lagrange describen la distribución de defectos en el sistema de coordenadas de laboratorio. Debido a esto, debemos rechazar el principio de relatividad el cual es fundamental para la teoría de la relatividad e iguala todos los sistemas de coordenadas. En la teoría geométrica de los defectos, postulamos que existe un marco de referencia privilegiado y que en ese sistema de coordenadas la métrica o el vielbein deben satisfacer la condición de que puedan reducirse a las ecuaciones de equilibrio en un medio elástico para la aproximación lineal con respecto al campo de desplazamiento, es decir, que se cumpla la ecuación 2.2.3. Si comparamos esta expresión con las ecuaciones de equilibrio 2.2.1 y 2.2.2, podemos encontrar que las condiciones para el gauge son

$$g^{\mu\nu} \overset{\circ}{\nabla}_{\mu} g_{\nu\rho} + \frac{\sigma}{1-2\sigma} g^{\mu\nu} \overset{\circ}{\nabla}_{\rho} g_{\mu\nu} = 0, \quad (2.2.46)$$

$$\overset{\circ}{g}^{\mu\nu} \overset{\circ}{\nabla}_{\mu} g_{\nu\rho} + \frac{\sigma}{1-2\sigma} \overset{\circ}{\nabla}_{\rho} g^T = 0, \quad (2.2.47)$$

las cuales coinciden la teoría de la elasticidad en la aproximación lineal y, por esto, se denomina gauge elástico. En la ecuación 2.2.47, utilizamos  $g^T = \overset{\circ}{g}^{\mu\nu} g_{\mu\nu}$  para la traza de la métrica. Además,  $\sigma$  es el módulo de Poisson ( $-1 \leq \sigma \leq 1/2$ ).

En las ecuaciones 2.2.46 y 2.2.47, la métrica  $\overset{\circ}{g}_{\mu\nu}$  es la métrica Euclidiana escrita en un sistema de coordenadas arbitrario. La derivada covariante  $\overset{\circ}{\nabla}_{\mu}$  se construye a partir de los símbolos de Christoffel correspondientes a la métrica  $\overset{\circ}{g}_{\mu\nu}$  y, por lo tanto,  $\overset{\circ}{\nabla}_{\mu} \overset{\circ}{g}_{\nu\rho} = 0$ . La métrica  $g_{\mu\nu}$  es la métrica que describe un defecto (solución exacta de las ecuaciones de Einstein).

Podemos notar que la elección del gauge no está definido de manera única ya que la métrica inducida es no lineal en el campo de desplazamientos, y diferentes ecuaciones para la métrica pueden tener la misma aproximación lineal. Desde el punto de vista geométrico, podemos decir que el medio con defecto es difeomórfico al espacio Euclideo  $\mathbb{R}^3$  con dos métricas  $\overset{\circ}{g}_{\mu\nu}$  y  $g_{\mu\nu}$ . La métrica  $\overset{\circ}{g}_{\mu\nu}$  es la métrica Euclidiana plana escrita en un sistema de coordenadas arbitrario. La métrica  $g_{\mu\nu}$  no es plana y describe la distribución de los defectos en el mismo sistema de coordenadas. De hecho, la métrica  $\overset{\circ}{g}_{\mu\nu}$  es utilizada para fijar el sistema de coordenadas en el cual la métrica  $g_{\mu\nu}$  es medida.

Las condiciones de gauge también pueden ser escritas para el vielbein  $e_{\mu}^i$ . Esto implica una arbitrariedad adicional ya que el vielbein es definido salvo una rotación local.

Esta invariancia conduce a distintas aproximaciones lineales para el vielbein en términos del campo de desplazamiento. Consideramos dos posibilidades en coordenadas Cartesianas:

$$e_{\mu i} \approx \delta_{\mu i} - \partial_{\mu} u_i, \quad (2.2.48)$$

$$e_{\mu i} \approx \delta_{\mu i} - \frac{1}{2}(\partial_{\mu} u_i + \partial_i u_{\mu}), \quad (2.2.49)$$

donde el índice  $i$  puede bajarse con la ayuda del símbolo de Kronecker. Para estas posibilidades y la condición de gauge 2.2.47, tenemos dos condiciones de gauge para el vielbein,

$$g^{\mu\nu} \overset{\circ}{\nabla}_{\mu} e_{\nu i} + \frac{1}{1-2\sigma} \overset{\circ}{e}^{\mu}_i \overset{\circ}{\nabla}_{\mu} e^T = 0, \quad (2.2.50)$$

$$g^{\mu\nu} \overset{\circ}{\nabla}_{\mu} e_{\nu i} + \frac{\sigma}{1-2\sigma} \overset{\circ}{e}^{\mu}_i \overset{\circ}{\nabla}_{\mu} e^T = 0, \quad (2.2.51)$$

donde  $e^T = \overset{\circ}{e}^{\mu}_i e_{\mu}^i$ . Estas condiciones difieren en el coeficiente del segundo término. Notamos que en coordenadas curvilíneas, la derivada covariante  $\overset{\circ}{\nabla}_{\mu}$  debe incluir la conexión  $SO(3)$  plana actuando en los índices  $i, j$ . Pueden elegirse otras condiciones de gauge que tengan la misma aproximación lineal, aunque la correcta elección actualmente no tiene respuesta. Por el momento, demostramos que el sistema de coordenadas debe ser fijado y la condición de gauge depende del módulo de Poisson, el cual es una cantidad observable.

Las condiciones de gauge 2.2.50 y 2.2.51 son ecuaciones de primer orden por sí mismas, y tienen cierta arbitrariedad. Por lo tanto, para fijar una única solución, debemos imponer condiciones de contorno adicionales al vielbein para cada problema.

El gauge elástico es utilizado para fijar los difeomorfismos. La expresión para la energía libre 2.2.45 es también invariante bajo rotaciones  $SO(3)$  locales, y deben ser fijadas. Para esto, utilizamos el gauge de Lorentz para la conexión:

$$\partial_{\mu} \omega_{\mu j}^i = 0. \quad (2.2.52)$$

Este gauge está escrito en el sistema de coordenadas Cartesiano del laboratorio. Haciendo que no existan disclinaciones ( $R_{\mu\nu j}^i = 0$ ), la conexión  $SO(3)$  es un gauge puro:

$$\omega_{\mu j}^i = \partial_{\mu} S^{-1}_j{}^k S_k^i, \quad S_j^i \in SO(3). \quad (2.2.53)$$

Y, por lo tanto,

$$\partial_{\mu} (\partial_{\mu} S^{-1}_j{}^k S_k^i) = 0. \quad (2.2.54)$$

### 2.2.1.7. Dislocaciones paralelas en cuña

En la ausencia de disclinaciones ( $R_{\mu\nu j}{}^i = 0$ ) la conexión  $SO(3)$  es un gauge puro y el problema se reduce a la solución de las ecuaciones de Einstein para el vielbein en el gauge elástico. Debido a que no existen disclinaciones, tenemos un espacio de paralelismo absoluto. Toda la geometría es determinada por el vielbein  $e_\mu{}^i$ , el cual define la torsión de manera única para una conexión  $SO(3)$  nula. Asumiremos que la conexión  $SO(3)$  es cero. El vielbein  $e_\mu{}^i$  satisface las ecuaciones de Einstein tridimensionales con la signatura de la métrica Euclidiana, las cuales provienen de la ecuación 2.2.45 para la energía libre con  $R_{\mu\nu j}{}^i = 0$ ,

$$\overset{\circ}{R}_{\mu\nu} - \frac{1}{2}g_{\mu\nu}\overset{\circ}{R} = T_{\mu\nu}. \quad (2.2.55)$$

donde agregamos la fuente de dislocaciones  $T_{\mu\nu}$  al lado derecho de las ecuaciones de Einstein (el tensor de energía-momento en gravedad).

Para nuestro fin debemos encontrar la solución a las ecuaciones de Einstein 2.2.55 que describan una dislocación en cuña. Consideramos un medio elástico con una distribución arbitraria de dislocaciones paralelas en cuña. Elegimos nuestro sistema de coordenadas de manera tal que el eje  $z = x^3$  sea paralela al eje de la dislocación, y que los ejes  $x^\alpha = x, y, \alpha = 1, 2$  sean perpendiculares al eje  $z$ . Entonces la métrica adquiere la forma

$$ds^2 = dl^2 + N^2 dz^2, \quad (2.2.56)$$

donde  $dl^2 = g_{\alpha\beta} dx^\alpha dx^\beta$  es la métrica bidimensional en el plano  $x, y$ . La métrica  $g_{\alpha\beta}$  y la función  $N(x, y)$  son independientes de  $z$  debido a la simetría traslacional sobre el eje  $z$ .

El tensor de curvatura para la métrica 2.2.56 tiene componentes

$$\overset{\circ}{R}_{\alpha\beta\gamma}{}^\delta = \overset{\circ}{R}{}^{(2)}{}_{\alpha\beta\gamma}{}^\delta, \quad \overset{\circ}{R}_{\alpha z\gamma}{}^z = \frac{1}{N}\nabla_\alpha\nabla_\gamma N, \quad \overset{\circ}{R}_{\alpha\beta\gamma}{}^z = \overset{\circ}{R}_{\alpha z\gamma}{}^\delta = 0, \quad (2.2.57)$$

donde  $\overset{\circ}{R}{}^{(2)}{}_{\alpha\beta\gamma}{}^\delta$  es el tensor de curvatura para la métrica bidimensional  $g_{\alpha\beta}$  y  $\nabla_\alpha$  es la derivada covariante bidimensional con los símbolos de Christoffel.

Elegimos la fuente de dislocaciones como

$$T_{zz} = \frac{2\pi}{\sqrt{g^{(2)}}} \sum_{n=1}^M \theta_n \delta^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n), \quad (2.2.58)$$

$$T_{\alpha\beta} = T_{\alpha z} = T_{z\alpha} = 0,$$

donde  $\delta^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) = \delta(x - x_n)\delta(y - y_n)$  es la función  $\delta$  bidimensional en el plano  $x, y$  centrada en el punto  $\mathbf{r}_n = (x_n, y_n)$ . El factor  $g^{(2)} = \det g_{\alpha\beta}$  enfrente de la suma es debido a la propiedad de la función  $\delta$  la cual no es una función sino una densidad tensorial respecto a una transformación general de coordenadas. Las ecuaciones de Einstein 2.2.55 se reducen a

$$\nabla_\alpha \nabla_\beta N - g_{\alpha\beta} \nabla^\gamma \nabla_\gamma N = 0, \quad (2.2.59)$$

$$-\frac{1}{2}N^3 R^{(2)} = \frac{2\pi}{\sqrt{g^{(2)}}} \sum_{n=1}^M \theta_n \delta^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n), \quad (2.2.60)$$

donde  $R^{(2)}$  es la curvatura escalar en dos dimensiones.

La métrica 2.2.56 es invariante bajo transformaciones de coordenadas en el plano  $x, y$ . Usando esta simetría, podemos fijar un gauge conforme en el plano

$$g_{\alpha\beta} = e^{2\phi} \delta_{\alpha\beta}, \quad (2.2.61)$$

donde  $\phi(x, y)$  es alguna función. En el gauge conforme, la ecuación 2.2.59 se vuelve

$$\partial_\alpha \partial_\beta N = 0. \quad (2.2.62)$$

Para condiciones de borde constantes en el contorno del plano  $x, y$ , esta ecuación tiene solución única  $N = cte$ . Cambiando la escala de la coordenada  $z$ , podemos fijar  $N = 1$  sin perder generalidad. Entonces la ecuación 2.2.60 se reduce a la ecuación de Poisson

$$\Delta\phi = -2\pi \sum_n \theta_n \delta^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n), \quad (2.2.63)$$

la cual tiene por solución general

$$\phi = \sum_n \theta_n \ln |\mathbf{r} - \mathbf{r}_n| + \frac{1}{2} \ln C, \quad C = cte > 0. \quad (2.2.64)$$

Así, la métrica en el plano  $x, y$  es

$$dl^2 = C \prod_n |\mathbf{r} - \mathbf{r}_n|^{2\theta_n} (dr^2 + r^2 d\varphi^2), \quad 0 \leq r < \infty, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi, \quad (2.2.65)$$

donde las coordenadas polares  $r, \varphi$  cubren todo el plano  $\mathbb{R}^2$ . Toda solución de las ecuaciones de Einstein está definida salvo la elección del sistema de coordenadas ya que

las ecuaciones son covariantes. Usando esta propiedad, podemos fijar  $C = 1$ , lo cual siempre es posible eligiendo la escala de  $r$ .

Consideremos ahora una simple dislocación de cuña con fuente en el origen para mostrar que de hecho la métrica 2.2.65 describe una distribución arbitraria de dislocaciones de cuña,

$$T_{zz} = \frac{2\pi}{\sqrt{g^{(2)}}} \theta \delta^{(2)}(x, y). \quad (2.2.66)$$

La correspondiente métrica 2.2.65 para  $C = 1$  es

$$dl^2 = r^{2\theta} (dr^2 + r^2 d\varphi^2). \quad (2.2.67)$$

Pasamos a las nuevas coordenadas

$$r' = \frac{1}{\alpha} r^\alpha, \quad \varphi' = \alpha \varphi, \quad \alpha = 1 + \theta, \quad (2.2.68)$$

en las cuales la métrica se vuelve Euclidiana,

$$dl^2 = dr'^2 + r'^2 d\varphi'^2, \quad (2.2.69)$$

donde el rango del ángulo polar difiere de  $2\pi$ :  $0 \leq \varphi' < 2\pi\alpha$ , y cubre el plano  $x, y$  con el ángulo  $2\pi\theta$  removido o agregado.

La transformación de coordenadas en 2.2.68 significa el pegado de los bordes de la cuña que apareció, lo cual produce un cono. Es decir, tanto la métrica 2.2.67 y 2.2.69 describen una singularidad cónica. El tensor de torsión y el tensor de curvatura son cero en todos lados menos en el origen.

La creación de una singularidad cónica coincide exactamente con la creación de una dislocación de cuña en la teoría geométrica de los defectos. La métrica más frecuentemente utilizada para singularidades cónicas se obtiene haciendo una transformación de coordenadas adicional

$$f = \alpha r', \quad \phi = \frac{1}{\alpha} \varphi'. \quad (2.2.70)$$

entonces

$$dl^2 = \frac{1}{\alpha^2} df^2 + f^2 d\phi^2, \quad \alpha = 1 + \theta. \quad (2.2.71)$$

### 2.2.1.8. Dislocación de cuña en el enfoque geométrico

Consideramos ahora una dislocación de cuña desde el punto de vista geométrico. La descripción de una dislocación de cuña requiere considerar un cilindro de radio finito  $R$ , como puede verse en la Figura ???. Cualitativamente, la creación de una dislocación de cuña coincide con la definición de una singularidad cónica. Sin embargo, existe una diferencia cuantitativa debido a que la métrica 2.2.71 depende únicamente en el déficit de ángulo  $\theta$  y no coincide con el hecho de que en la aproximación lineal la teoría de la elasticidad depende del módulo de Poisson. Para solucionar tal problema adoptamos

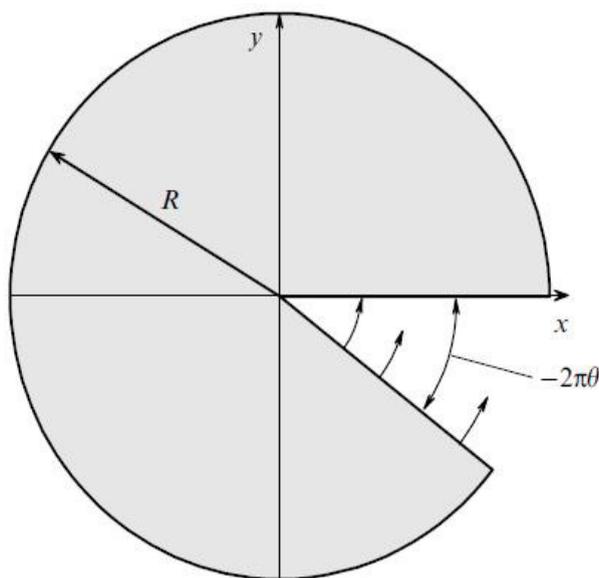


FIGURA 2.2: Dislocación de cuña con déficit de ángulo  $\theta$ . Para  $\theta$  positivo o negativo, la cuña es agregada o quitada respectivamente.

el gauge elástico 2.2.51 como la opción más simple. Debemos encontrar la solución en un sistema de coordenadas y luego buscar la transformación de coordenadas de tal manera que la condición de gauge se satisfaga.

El vielbein puede ser asociado con la métrica 2.2.71 como

$$e_{\hat{r}} = \frac{1}{\alpha}, \quad e_{\hat{\varphi}} = f. \tag{2.2.72}$$

Aquí, el sombrero sobre un índice corresponde al sistema de coordenadas ortonormal, y el índice sin sombrero al sistema de coordenadas adoptado. Transformamos la coordenada radial  $f \rightarrow f(r)$  debido a que la dislocación de cuña es simétrica bajo rotaciones en el plano  $x, y$ . Luego de la transformación, las componentes del vielbein

toman la forma

$$e_r^{\hat{r}} = \frac{f'}{\alpha}, \quad e_\varphi^{\hat{\varphi}} = f \quad (2.2.73)$$

donde el prima denota diferenciación respecto a  $r$ . Elegimos el vielbein correspondiente a la métrica Euclidiana como

$$\overset{\circ}{e}_r^{\hat{r}} = 1, \quad \overset{\circ}{e}_\varphi^{\hat{\varphi}} = r. \quad (2.2.74)$$

Esto define los símbolos de Christoffel  $\overset{\circ}{\Gamma}_{\mu\nu}^\rho$  y la conexión  $SO(3)$   $\overset{\circ}{\omega}_{\mu i}^j$ , los cuales definen la derivada covariante. Escribimos solamente las componentes no triviales

$$\overset{\circ}{\Gamma}_{r\varphi}^\varphi = \overset{\circ}{\Gamma}_{\varphi r}^\varphi = \frac{1}{r}, \quad \overset{\circ}{\Gamma}_{\varphi\varphi}^r = -r, \quad \overset{\circ}{\omega}_{\varphi\hat{r}}^{\hat{\varphi}} = -\overset{\circ}{\omega}_{\varphi\hat{\varphi}}^{\hat{r}} = 1. \quad (2.2.75)$$

Substituyendo el vielbein en la condición de gauge 2.2.51 se obtiene la siguiente ecuación

$$\frac{f''}{\alpha} + \frac{f'}{\alpha r} - \frac{f}{r^2} + \frac{\sigma}{1-2\sigma} \left( \frac{f''}{\alpha} + \frac{f'}{\alpha r} - \frac{f}{r^2} \right) = 0. \quad (2.2.76)$$

cuya solución general depende de los constantes arbitrarias  $C_{1,2}$ ,

$$f = C_1 r^{\gamma_1} + C_2 r^{\gamma_2}, \quad (2.2.77)$$

donde los exponentes  $\gamma_{1,2}$  están definidos por la ecuación cuadrática

$$\gamma^2 + 2\gamma\theta b - \alpha = 0, \quad b = \frac{\sigma}{1-2\sigma}. \quad (2.2.78)$$

Para fijar las constantes  $C_{1,2}$ , imponemos las condiciones de contorno en el vielbein:

$$e_r^{\hat{r}}|_{r=R} = 1, \quad e_\varphi^{\hat{\varphi}}|_{r=0} = 0. \quad (2.2.79)$$

La primer condición de contorno corresponde a la ausencia de fuerzas externas en la superficie del cilindro, y la segunda condición corresponde a la ausencia de una componente angular del tensor de deformaciones en el núcleo de la dislocación. La ecuación 2.2.79 define los valores de las constantes de integración

$$C_1 = \frac{\alpha}{\gamma_1 R^{\gamma_1-1}}, \quad C_2 = 0. \quad (2.2.80)$$

El vielbein obtenido define la métrica

$$dl^2 = \left( \frac{r}{R} \right)^{2\gamma_1-2} \left( dr^2 + \frac{\alpha^2 r^2}{\gamma_1^2} d\varphi^2 \right), \quad (2.2.81)$$

donde

$$\gamma_1 = -\theta b + \sqrt{\theta^2 b^2 + 1 + \theta}. \quad (2.2.82)$$

Esta es la solución al problema planteado, y es válida para todos los ángulos de déficit  $\theta$  y para todo  $0 < r < R$ . La métrica obtenida depende de tres constantes:  $\theta$ ,  $\sigma$  y  $R$ . La dependencia del ángulo  $\theta$  es debido al lado derecho de las ecuaciones de Einstein [2.2.55](#). La dependencia en el módulo de Poisson viene del gauge elástico [2.2.51](#) y, finalmente, la dependencia del radio del cilindro viene de la condición de contorno [2.2.79](#).

## 2.2.2. Introducción a la teoría del estado sólido

En esta sección se analizarán conceptos básicos de la teoría del estado sólido con el fin de adquirir el conocimiento necesario para afrontar los cálculos del método de enlaces fuertes. Comenzaremos con una breve descripción de las redes cristalinas y luego analizaremos dichas redes bajo la acción de un potencial periódico demostrando el teorema de Bloch.

### 2.2.2.1. Red de Bravais

Un concepto fundamental en la descripción de cualquier sólido cristalino es el de red de Bravais, que especifica el arreglo periódico en el cual se ordenan las repetidas unidades del cristal. Las unidades pueden ser de un átomo, un grupo de átomos, moléculas o iones, etc., aunque la red de Bravais resume simplemente la geometría de la estructura periódica subyacente, sin importar cual es la verdadera unidad. Podemos definir la red de Bravais como un arreglo infinito de puntos discretos con una disposición y orientación que parece exactamente la misma desde cualquier puntos en que se lo mire. Complementariamente, podemos decir que una red tridimensional de Bravais consiste en todos puntos con vectores posición  $\mathbf{R}$  de la forma

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad (2.2.83)$$

donde  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  y  $\mathbf{a}_3$  son cualesquiera tres vectores no coplanares, y el dominio de  $n_1$ ,  $n_2$  y  $n_3$  pertenece a los números enteros.

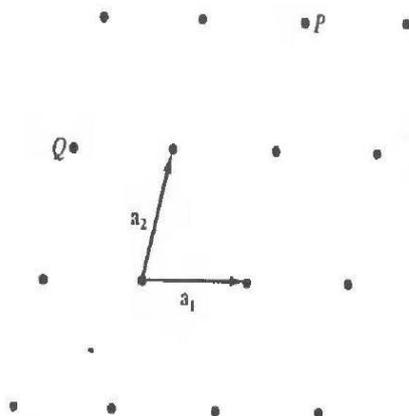


FIGURA 2.3: Red de Bravais bidimensional. Se muestran los vectores primitivos  $\mathbf{a}_1$  y  $\mathbf{a}_2$ . Los puntos de la red son una combinación lineal de estos con coeficientes enteros.

Los vectores  $\mathbf{a}_i$  que aparecen en la definición de la red de Bravais se denominan vectores primitivos, los cuales generan y abarcan dicha red. Es importante notar que no solo la disposición sino la orientación debe parecer la misma desde cualquier punto en una red de Bravais. Consideremos los vértices de una red hexagonal bidimensional. El arreglo de puntos tiene el mismo aspecto visto desde puntos adyacentes solo si la hoja es girada  $180^\circ$  cada vez que se mueve de un punto al siguiente. Las relaciones estructurales son idénticas, pero no su orientación, entonces los vértices de una red hexagonal no forman una red de Bravais.

### 2.2.2.2. Redes infinitas y cristales finitos

Debido a que todos los puntos son equivalentes, la red de Bravais debe ser infinita en extensión. Los cristales reales son finitos, pero si son lo suficiente largos la gran mayoría de los puntos estarán muy lejos de la superficie como para ser afectados por su existencia. La ficción de un sistema infinito es una idealización muy útil. Si los efectos de la superficie son de interés entonces la noción de red de Bravais sigue siendo relevante, pero ahora uno debe pensar en un cristal llenando una parte finita de la red de Bravais ideal.

Frecuentemente uno considera cristales finitos, no por los efectos de su superficie, sino por conveniencia. Dados los vectores primitivos, usualmente se considera una red finita de  $N$  sitios que sean puntos de la forma  $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ , donde  $0 \leq n_1 < N_1$ ,  $0 \leq n_2 < N_2$ ,  $0 \leq n_3 < N_3$  y  $N = N_1N_2N_3$ . Este artificio está directamente relacionado con la generalización de la descripción de sistemas cristalinos con condiciones de borde periódicas.

### 2.2.2.3. Número de coordinación

Los puntos de la red de Bravais que están más cerca de un punto determinado se denominan primeros vecinos. Debido a la naturaleza periódica de la red de Bravais, cada punto tiene el mismo número de primeros vecinos. Este número es una propiedad de la red, y se lo denomina número de coordinación de la red. La noción del número de coordinación puede ser extendida a otros arreglos de puntos que no son redes de Bravais, proporcionando que cada punto del arreglo tenga el mismo número de primeros vecinos.

#### 2.2.2.4. Celda unidad primitiva

Al volumen de espacio que, cuando se traslada a través de todos los vectores de una red de Bravais, llena todo el espacio sin superposición o dejando espacios vacíos se lo denomina celda primitiva o celda unidad primitiva de la red. No existe una única forma de elegir una celda primitiva para una red de Bravais dada. Una celda primitiva debe contener precisamente un punto de la red (salvo que esté posicionada de tal manera que existan puntos en su superficie). De esto sigue que si  $n$  es la densidad de puntos en el lattice y  $v$  es el volumen de la celda primitiva, entonces  $nv = 1$ . Así,  $v = 1/n$ . Debido a que este resultado se mantiene para cualquier celda primitiva, el volumen de dicha celda es independiente de la elección de la celda.

La celda primitiva más obvia para asociar con un conjunto particular de vectores primitivos,  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$ ,  $\mathbf{a}_3$ , es conjunto de puntos  $\mathbf{r}$

$$\mathbf{r} = x_1\mathbf{a}_1 + x_2\mathbf{a}_2 + x_3\mathbf{a}_3 \quad (2.2.84)$$

para todo  $x_i$  variando continuamente entre 0 y 1, es decir, el paralelepípedo generado por los tres vectores  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  y  $\mathbf{a}_3$ . Esta elección tiene la desventaja de no mostrar la simetría completa de la red de Bravais. A veces es importante trabajar con celdas que tengan la simetría completa de la red de Bravais y, para esto existen dos soluciones ampliamente utilizadas: la celda unidad convencional y la celda primitiva de Wigner-Seitz.

#### 2.2.2.5. Celda unidad convencional

Uno puede llenar el espacio con celdas unidad no primitivas conocidas como celdas unidad o celdas unidad convencionales. Una celda unidad es una región que llena el espacio sin superposición al ser trasladada a través de un subconjunto de vectores de una red de Bravais. La celda unidad convencional es generalmente elegida con mayor tamaño que la celda unidad primitiva con el fin de obtener la simetría requerida. Así, por ejemplo, uno describe la red cúbica centrada en el cuerpo en términos de una celda cúbica que tiene el doble de tamaño que la celda unidad primitiva. Los números que especifican el tamaño de la celda unidad (tal como un solo número  $a$  para cristales cúbicos) se denominan constantes de la red.

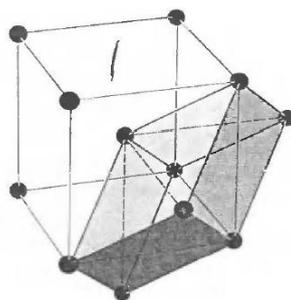


FIGURA 2.4: Celda unidad primitiva y convencional de una red de Bravais cúbica centrada en el cuerpo. La celda primitiva (sombreada) tiene la mitad del volumen de la celda convencional cúbica.

### 2.2.2.6. Celda primitiva de Wigner-Sietz

Se puede construir un celda unidad primitiva con la simetría completa de la red de Bravais, la cual es la más utilizada, denominada celda de Wigner-Sietz. La celda de Wigner-Seitz sobre un punto de la red es la región del espacio que está más cerca de ese punto que de cualquier otro. La celda de Wigner-Sietz cuando es trasladada sobre todos los vectores de la red, llena todo el espacio sin superposiciones, es decir, es una celda primitiva.

Debido a que no hay nada en la definición de la celda de Wigner-Sietz que se refiera a una elección particular de vectores primitivos, dicha celda será igual de simétrica que la red de Bravais.

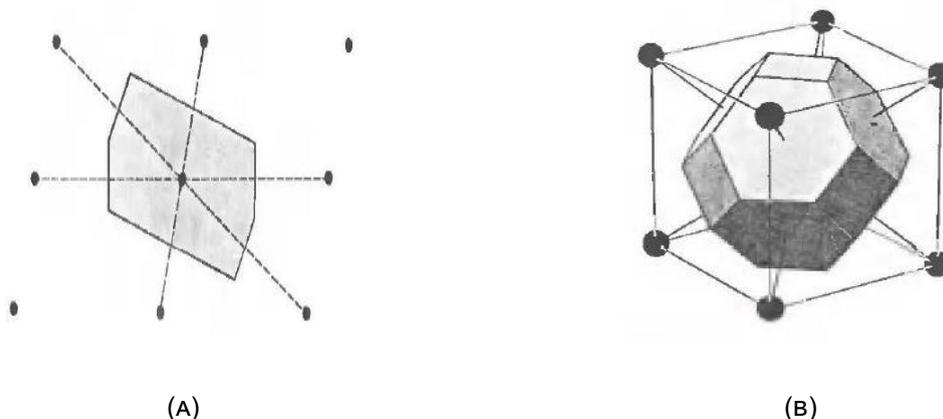


FIGURA 2.5: 2.5a Celda de Wigner-Sietz para una red de Bravais bidimensional.; 2.5b Celda de Wigner-Sietz para una red de Bravais cúbica centrada en el cuerpo.

Podemos notar que la celda de Wigner-Sietz sobre un punto de la red puede ser construida dibujando líneas que conectan al punto con todos los demás en la red, bisecando

cada línea con un plano, y tomando el menor poliedro que contenga al punto rodeado por esos planos.

### 2.2.2.7. Estructura cristalina, red con una base

Un cristal real puede ser descrito dado su red de Bravais subyacente, junto con la descripción del arreglo de átomos, moléculas, iones, etc., en una celda primitiva particular. Cuando se enfatiza en la diferencia entre el patrón de puntos abstracto que componen la red de Bravais y el cristal real que encarna la red, el término técnico utilizado es el de estructura cristalina. Una estructura cristalina consiste en copias idénticas de la misma unidad física, llamada base, localizada en los puntos de la red de Bravais. A veces se utiliza el término red con una base. Por ejemplo, los vértices de una red bidimensional hexagonal, aunque no es una red de Bravais, puede ser representada como una red de Bravais triangular bidimensional con una base de dos puntos.

La estructura cristalina es una generalización de las redes de Bravais, en donde se agrega simplemente un vector base de  $n$  componentes según se necesite, es decir

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 + \mathbf{b}_i, \quad \mathbf{b}_i = \{b_1, b_2, \dots, b_n\} \quad (2.2.85)$$

### 2.2.2.8. Definición de red recíproca

La red recíproca desempeña un papel fundamental en la mayoría de los estudios analíticos de las estructuras periódicas. Consideremos un conjunto de puntos  $\mathbf{R}$  constituyendo una red de Bravais, y una onda plana,  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ . Para un  $k$  general, tal onda plana no tendrá la periodicidad de la red de Bravais, pero para una elección particular del vector de onda sí. El conjunto de todos los vectores de onda  $\mathbf{K}$  que devuelven ondas planas con la periodicidad dada por una red de Bravais es conocido como red recíproca. Analíticamente,  $\mathbf{K}$  pertenece a la red recíproca de una red de Bravais de puntos  $\mathbf{R}$ , siempre que la relación

$$e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{R}+\mathbf{r})} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.2.86)$$

se mantenga para cualquier  $\mathbf{r}$ , y para todo  $\mathbf{R}$  de la red de Bravais. Factorizando  $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$ , podemos caracterizar la red recíproca como el conjunto de vectores de onda  $\mathbf{K}$  que satisfacen

$$e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} = 1 \quad (2.2.87)$$

para todo  $\mathbf{R}$  de la red de Bravais.

Se debe notar que la red recíproca está definida en base a una red de Bravais particular. La red de Bravais que determina una red recíproca dada es usualmente denominada como red directa. También notar que incluso si uno puede definir un conjunto de vectores  $\mathbf{K}$  que satisfacen 2,2,87 para un conjunto arbitrario de vectores  $\mathbf{R}$ , tal conjunto de  $\mathbf{K}$  se denomina red recíproca solo si el conjunto de vectores  $\mathbf{R}$  es una red de Bravais.

### 2.2.2.9. Red recíproca es una red de Bravais

La red recíproca es en sí mismo una red de Bravais. Vale considerar una prueba que proporciona un algoritmo explícito para construir la red recíproca. Sean  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  y  $\mathbf{a}_3$  un conjunto de vectores primitivos para la red directa. Entonces la red recíproca puede ser generada por los tres vectores primitivos

$$\begin{aligned}\mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \\ \mathbf{b}_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \\ \mathbf{b}_3 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}.\end{aligned}\tag{2.2.88}$$

Para verificar que 2.2.88 da un conjunto de vectores primitivos para la red recíproca, notamos que  $\mathbf{b}_i$  debe satisfacer

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij},\tag{2.2.89}$$

donde  $\delta_{ij}$  es la delta de Kronecker.

Ahora, cualquier vector  $\mathbf{k}$  puede ser escrito como una combinación lineal de  $\mathbf{b}_i$

$$\mathbf{k} = k_1 \mathbf{b}_1 + k_2 \mathbf{b}_2 + k_3 \mathbf{b}_3.\tag{2.2.90}$$

Si  $\mathbf{R}$  es cualquier vector de la red directa, entonces

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3,\tag{2.2.91}$$

donde  $n_i$  son enteros. Entonces de 2.2.89 sigue

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} = 2\pi(k_1n_1 + k_2n_2 + k_3n_3). \quad (2.2.92)$$

Para que  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$  sea unitario para todo  $\mathbf{R}$   $\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}$  debe ser  $2\pi$  veces un número entero para cualquier elección de  $n_i$ . Esto requiere que los coeficientes  $k_i$  sean también enteros. Así, la condición 2.2.87 de que  $\mathbf{K}$  sea un vector de la red recíproca se satisface justamente con aquellos vectores que son combinación lineal de  $\mathbf{b}_i$  con coeficientes enteros. Entonces la red recíproca es una red de Bravais y los vectores  $\mathbf{b}_i$  pueden ser tomados como vectores primitivos.

### 2.2.2.10. Primera zona de Brillouin

La celda primitiva de Wigner-Seitz de la red recíproca es conocida como primera zona de Brillouin. Como el nombre sugiere, uno puede definir zonas de Brillouin más grandes, las cuales son celdas primitivas de diferentes tipos que surgen en la teoría de niveles electrónicos en un potencial periódico.

Aunque la celda de Wigner-Seitz y la primera zona de Brillouin se refieren a construcciones geométricas idénticas, en la práctica el último término es aplicado únicamente para la celda en el espacio  $k$ . En particular, cuando hablamos de la primera zona de Brillouin de una red de Bravais particular en el espacio  $r$ , a lo que nos referimos es a la celda de Wigner-Seitz de la red recíproca asociada.

### 2.2.2.11. Potencial periódico

Debido a que los iones en un cristal perfecto están distribuidos de una manera regular y periódica, podemos considerar el problema de un electrón en un potencial periódico  $U(\mathbf{r})$  con la periodicidad subyacente de una red de Bravais, es decir

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}) \quad (2.2.93)$$

para todo vector de la red de Bravais  $\mathbf{R}$ .

La condición de perfecta periodicidad es una idealización. Los sólidos reales nunca son absolutamente puros, y siempre existen impurezas que hacen que el cristal no sea

igual en todas partes. Además, existe una probabilidad dependiente de la temperatura de no encontrar iones o que se encuentren en una posición diferente a la regular que destruye la simetría de traslación perfecta de un cristal puro. Por último, los iones no son estacionarios sino que continuamente sufren vibraciones térmicas respecto a sus posiciones de equilibrio.

Estas imperfecciones son de gran importancia debido a que, por ejemplo, son responsables de que la conductividad eléctrica de un metal no sea infinita. Se pueden mejorar los resultados dividiendo el problema en dos partes: a) considerar un cristal ideal ficticio en el cual existe un potencial periódico, y b) los efectos de todas las desviaciones de una periodicidad perfecta en las propiedades de un hipotético cristal ideal, tratadas como pequeñas perturbaciones.

El problema de electrones en un potencial periódico no solo surge en el contexto de metales, sino que las consecuencias más generales aplican a todos los sólidos cristalinos y juegan un papel importante en el tratamiento de aislantes y semiconductores. Tal problema, en principio, es un fenómeno en el que intervienen muchos electrones, es decir, no solo hay que considerar el Hamiltoniano de un electrón interactuando con el núcleo atómico, sino también considerar las interacciones entre electrones. En la aproximación de electrones independientes esta interacción es representada por un potencial efectivo de un electrón  $U(\mathbf{r})$ . Aquí simplemente observaremos que sin importar la forma del potencial efectivo, si el cristal es perfectamente periódico, entonces debe satisfacer 2.2.93. De este hecho podemos obtener numerosas conclusiones importantes.

Ahora examinaremos las propiedades generales de la ecuación de Schrödinger para un solo electrón,

$$H\psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right) \psi = \varepsilon\psi, \quad (2.2.94)$$

Los electrones independientes cada uno de los cuales obedece la ecuación de Schrödinger de un electrón con potencial periódico, son conocidos como electrones de Bloch. Los estados estacionarios de los electrones de Bloch tienen una propiedad muy importante como consecuencia de la periodicidad del potencial  $U$ , cumplen el teorema de Bloch.

### 2.2.2.12. Teorema de Bloch

Los autoestados  $\psi$  del Hamiltoniano de un electrón  $-\hbar^2\nabla^2/2m+U(\mathbf{r})$ , donde  $U(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = U(\mathbf{r})$  para todo  $\mathbf{R}$  en una red de Bravais, pueden ser elegidos para tener la forma de una onda plana multiplicado por una función con periodicidad de la red de Bravais:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.2.95)$$

donde

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.2.96)$$

para todo  $\mathbf{R}$  en una red de Bravais.

Notar que las ecuaciones 2.2.113 y 2.2.96 implican que

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.2.97)$$

El teorema de Bloch es formulado de forma alternativa como: los autoestados de  $H$  pueden ser elegidos de tal manera que asociados a cada  $\psi$  haya un vector de onda  $\mathbf{k}$  tal que

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}). \quad (2.2.98)$$

para cada  $\mathbf{R}$  en una red de Bravais.

Desarrollaremos dos demostraciones del teorema de Bloch, una desde consideraciones generales de mecánica cuántica y otra por construcción explícita.

### 2.2.2.13. Demostración del teorema de Bloch

Para cada vector  $\mathbf{R}$  de una red de Bravais definimos el operador traslación  $T_{\mathbf{R}}$  el cual, cuando opera sobre cualquier función  $f(\mathbf{r})$ , corre el argumento en  $\mathbf{R}$ :

$$T_{\mathbf{R}}f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}). \quad (2.2.99)$$

Debido a que el Hamiltoniano es periódico, entonces

$$T_{\mathbf{R}}H\psi = H(\mathbf{r} + \mathbf{R})\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = H(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = HT_{\mathbf{R}}\psi. \quad (2.2.100)$$

Y como la expresión anterior 2.2.100 se mantiene para cualquier función  $\psi$ , se tiene el operador identidad

$$T_{\mathbf{R}}H = HT_{\mathbf{R}}. \quad (2.2.101)$$

Además, el aplicar dos traslaciones sucesivas o depende del orden en el que son aplicadas, debido a que para cualquier  $\psi(\mathbf{r})$

$$T_{\mathbf{R}}T_{\mathbf{R}'}\psi(\mathbf{r}) = T_{\mathbf{R}'}T_{\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R} + \mathbf{R}'). \quad (2.2.102)$$

Por lo tanto,

$$T_{\mathbf{R}}T_{\mathbf{R}'} = T_{\mathbf{R}'}T_{\mathbf{R}} = T_{\mathbf{R}+\mathbf{R}'}. \quad (2.2.103)$$

Las ecuaciones 2.2.101 y 2.2.103 aseguran que los operadores  $T_{\mathbf{R}}$  para todos los vectores de una red de Bravais  $\mathbf{R}$  y el Hamiltoniano  $H$  forman un conjunto de operadores conmutativos. Entonces los autoestados de  $H$  pueden ser elegidos para ser simultáneamente autoestados de  $T_{\mathbf{R}}$ :

$$H\psi = \varepsilon\psi,$$

$$T_{\mathbf{R}}\psi = c(\mathbf{R})\psi. \quad (2.2.104)$$

Los autovalores  $c(\mathbf{R})$  del operador de traslación están relacionados debido a la condición 2.2.103, por un lado

$$T_{\mathbf{R}}T_{\mathbf{R}'}\psi = c(\mathbf{R})T_{\mathbf{R}'}\psi = c(\mathbf{R})c(\mathbf{R}')\psi, \quad (2.2.105)$$

mientras que por otro lado, de acuerdo a 2.2.103,

$$T_{\mathbf{R}}T_{\mathbf{R}'}\psi = T_{\mathbf{R}+\mathbf{R}'}\psi = c(\mathbf{R} + \mathbf{R}'). \quad (2.2.106)$$

De esto sigue que los autovalores deben satisfacer

$$c(\mathbf{R} + \mathbf{R}') = c(\mathbf{R})c(\mathbf{R}'). \quad (2.2.107)$$

Ahora hagamos que  $\mathbf{a}_i$  sean tres vectores primitivos de una red de Bravais. Siempre podemos expresar  $c(\mathbf{a}_i)$

$$c(\mathbf{a}_i) = e^{2i\pi x_i} \quad (2.2.108)$$

mediante una adecuada elección de  $x_i$ . Al realizar sucesivas aplicaciones de 2.2.107 sigue que si  $\mathbf{R}$  es un vector general de una red de Bravais dado por

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, \quad (2.2.109)$$

entonces

$$c(\mathbf{R}) = c(\mathbf{a}_1)^{n_1} c(\mathbf{a}_2)^{n_2} c(\mathbf{a}_3)^{n_3}. \quad (2.2.110)$$

Pero esto es equivalente a

$$c(\mathbf{R}) = e^{\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}, \quad (2.2.111)$$

donde

$$\mathbf{k} = x_1 \mathbf{b}_1 + x_2 \mathbf{b}_2 + x_3 \mathbf{b}_3 \quad (2.2.112)$$

y los  $\mathbf{b}_i$  son los vectores de la red recíproca que satisfacen  $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$ . Hemos probado que se pueden elegir los autoestados  $\psi$  de  $H$  tal que para todo vector de una red de Bravais  $\mathbf{R}$ ,

$$T_{\mathbf{R}}\psi = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = c(\mathbf{R})\psi = e^{\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}). \quad (2.2.113)$$

lo cual es precisamente el teorema de Bloch [2.2.98](#).

### 2.2.2.14. Condición de frontera de Born-Von Karman

Imponiendo una condición de frontera adecuada en la función de onda, podemos demostrar que el vector de onda  $\mathbf{k}$  debe ser real, y llegar a una condición que restringe los valores permitidos de  $\mathbf{k}$ . Entonces imponemos la condición de frontera periódica

$$\psi(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = \psi \mathbf{r}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.2.114)$$

donde los  $\mathbf{a}_i$  son tres vectores primitivos y los  $N_i$  son todos los enteros de orden  $N^{1/3}$ , donde  $N = N_1 N_2 N_3$  es el número total de celdas primitivas en el cristal.

Aplicando el teorema de Bloch [2.2.113](#) a la confición de frontera [2.2.114](#) encontramos que

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = e^{iN_i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.2.115)$$

lo cual requiere que

$$e^{iN_i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i} = 1, \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.2.116)$$

Cuando  $\mathbf{k}$  tiene la forma [2.2.112](#), la ecuación [2.2.116](#) requiere

$$e^{i2\pi N_i x_i} = 1, \quad (2.2.117)$$

y, en consecuencia, debemos tener

$$x_i = \frac{m_i}{N_i}, \quad m_i \text{ entero.} \quad (2.2.118)$$

Por lo tanto, la forma general para los vectores de onda de Bloch permitidos es

$$\mathbf{k} = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{N_i} \mathbf{b}_i, \quad (2.2.119)$$

De la ecuación anterior sigue que el volumen  $\Delta \mathbf{k}$  del espacio  $k$  por cada valor permitido de  $\mathbf{k}$  es

$$\Delta \mathbf{k} = \frac{\mathbf{b}_1}{N_1} \cdot \left( \frac{\mathbf{b}_2}{N_2} \times \frac{\mathbf{b}_3}{N_3} \right). \quad (2.2.120)$$

Debido a que  $\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)$  es el volumen de la celda primitiva en la red recíproca, la ecuación 2.2.120 dice que el número de vectores de onda permitidos en una celda primitiva de la red recíproca es igual al número de sitios en el cristal.

El volumen de la celda primitiva en la red recíproca es  $(2\pi)^3/v$ , donde  $v = V/N$  es el volumen de la celda primitiva en la red directa, entonces la ecuación 2.2.120 puede ser escrita como

$$\Delta \mathbf{k} = \frac{(2\pi)^3}{V}. \quad (2.2.121)$$

### 2.2.2.15. Observaciones sobre el teorema de Bloch

1. El teorema de Bloch introduce el vector de onda  $\mathbf{k}$ , el cual no es proporcional al momento electrónico  $\mathbf{p}$ . Esto puede verse debido a que el Hamiltoniano no posee invariancia de traslación en la presencia de un potencial variable y, por lo tanto, sus autoestados no pueden ser simultáneamente autoestados del operador momento. Podemos verlo aplicando el operador momento en  $\psi_{n\mathbf{k}}$

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \psi_{n\mathbf{k}} = \frac{\hbar}{i} \nabla (e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})), \quad (2.2.122)$$

lo cual no es, de manera general, una constante multiplicada por  $\psi_{n\mathbf{k}}$ , es decir, no es un autoestado de momento. De todas formas,  $\hbar \mathbf{k}$  es una extensión natural de  $\mathbf{p}$  para el caso de un potencial periódico y es conocido como momento cristalino del electrón.

2. El vector de onda  $\mathbf{k}$  que aparece en el teorema de Bloch puede ser siempre confinado en la primera zona de Brillouin. Esto es debido a que cualquier  $\mathbf{k}'$  fuera de la

primera zona de Brillouin puede ser escrito como

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{K} \quad (2.2.123)$$

donde  $\mathbf{K}$  es un vector de la red recíproca y  $\mathbf{k}$  se encuentra en la primer zona. Debido a que  $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} = 1$  para cualquier vector de la red recíproca, si el teorema de Bloch vale para  $\mathbf{k}'$ , entonces también valdrá para  $\mathbf{k}$ .

**3.** El índice  $n$  aparece en el teorema de Bloch como consecuencia de que para cada  $\mathbf{k}$  hay varias soluciones a la ecuación de Schrödinger.

$$H_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left( \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{i} \nabla + \mathbf{k} \right) + U(\mathbf{r}) \right) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.2.124)$$

La condición de frontera periódica puede hacer que la ecuación anterior sea un problema de autovalores Hermíticos restringido a una celda primitiva del cristal. Debido a que el problema de autovalores está fijado en un volumen finito, podemos esperar encontrar infinitas soluciones con autovalores discretamente espaciados, lo cual identificamos con el índice de banda  $n$ .

Podemos notar que el vector de onda  $\mathbf{k}$  aparece como un parámetro en el Hamiltoniano  $H_{\mathbf{k}}$ . Por lo tanto, podemos esperar que cada nivel de energía, para un  $\mathbf{k}$  dado, varíe de manera continua a medida que  $\mathbf{k}$  varíe. De esta forma, arribamos a la descripción de niveles de un electrón en un potencial periódico en términos de una familia de funciones continuas  $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ .

**4.** Como consecuencia de que las funciones de onda y los niveles de energía para dos valores de  $\mathbf{k}$  que difieran en un vector de la red recíproca deben ser idénticas, podemos asignar los índices  $n$  de tal manera que por cada  $n$  los autovalores y los autoestados son funciones periódicas de  $\mathbf{k}$  en la red recíproca

$$\begin{aligned} \psi_{n,\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{r}) &= \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \\ \varepsilon_{n,\mathbf{k}+\mathbf{K}} &= \varepsilon_{n\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (2.2.125)$$

Esto conlleva a la descripción de los niveles de energía de un electrón en un potencial periódico en términos de una familia de funciones continuas  $\varepsilon_{n\mathbf{k}}$  o  $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ , cada una con la periodicidad de la red recíproca. La información contenida en estas funciones se denomina como la estructura de bandas del sólido.

Por cada  $n$ , el conjunto de niveles electrónicos especificados por  $\varepsilon_n(\mathbf{k})$  se denominan bandas de energía.

5. Puede mostrarse que un electrón en un nivel determinado por el índice de banda  $n$  y por el vector de onda  $\mathbf{k}$  tiene una velocidad media no nula, dada por

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}). \quad (2.2.126)$$

Esto nos dice que existen niveles estacionarios para un electrón en un potencial periódico en los cuales, a pesar de la interacción de los electrones con la red fija de iones, se mueven perpetuamente sin ningún tipo de degradación en su velocidad media.

### 2.2.2.16. Superficie de Fermi

El estado base de  $N$  electrones libres se construye ocupando todos los niveles  $\mathbf{k}$  de un electrón con energías  $\varepsilon(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m$  menos que  $\varepsilon_F$ , donde  $\varepsilon_F$  es determinada requiriendo que el número total de niveles de un electrón con energías menores a  $\varepsilon_F$  sea igual al número total de electrones.

El estado base de Bloch se construye de manera similar, excepto que los niveles de un electrón son descritos con los números cuánticos  $n$  y  $\mathbf{k}$ ,  $\varepsilon_F$  no tiene la forma de electrones libres, y  $\mathbf{k}$  debe estar confinado a una simple celda primitiva de la red recíproca si cada nivel es contado una única vez. Cuando el nivel más bajo de estos se encuentra ocupado con una determinada cantidad de electrones, pueden resultar dos configuraciones distintas:

1. Una cierta cantidad de bandas pueden estar completamente llenas, y otras permanecer vacías. La diferencia en energía entre el nivel más alto y el más bajo ocupados es conocida como "brecha." "gap" de bandas. Podemos encontrar que sólidos con un gap de bandas superior a  $k_B T$  ( $T$  cerca a la temperatura ambiente) son aislantes. Si el gap de bandas es comparable con  $k_B T$ , el sólido es conocido como un semiconductor intrínseco. Debido a que el número de niveles en un banda es igual al número de celdas primitivas en el cristal y debido a que cada nivel puede alojar dos electrones (uno por cada spin), una configuración con gap de bandas solo puede surgir cuando el número de electrones por celda primitiva es par.

2. Algunas bandas pueden estar parcialmente llenas. Cuando esto ocurre, la energía del nivel más alto ocupado, la energía de Fermi  $\varepsilon_F$ , se encuentra en el rango de energías de una o más bandas. Por cada banda parcialmente llena existirá una superficie en el espacio  $k$  separando los niveles ocupados de los desocupados. El conjunto de todas estas superficies es conocido como la superficie de Fermi, es una generalización para los electrones de Bloch de la esfera de Fermi para electrones libres. Las partes de la superficie de Fermi que surgen de una única banda parcialmente llena son conocidas como “ramas.” “branches” de la superficie de Fermi.

Analíticamente, la rama de la superficie de Fermi en la banda  $n$  es la superficie en el espacio  $k$  (si existe) determinada por

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_F \quad (2.2.127)$$

Así, la superficie de Fermi es una superficie de energía constante (o un conjunto de superficies con energías constantes) en el espacio  $k$ , comparables con las equipotenciales de la teoría electrostática las cuales son superficies de energía constante en el espacio real.

### 2.2.2.17. Densidad de niveles

Usualmente se deben calcular cantidades que son sumas ponderadas sobre los niveles electrónicos de varias propiedades de un electrón. Tales cantidades son de la forma

$$Q = 2 \sum_{n, \mathbf{k}} Q_n(\mathbf{k}), \quad (2.2.128)$$

donde cada  $n$  es sumado sobre todos los valores permitidos de  $\mathbf{k}$  dando físicamente distintos niveles.

En el límite del un cristal grande los valores permitidos de  $\mathbf{k}$  quedan muy cerca uno de otro, y la suma puede ser reemplazada por una integral. Teniendo en cuenta el volumen en el  $k$  espacio, encontramos que

$$q = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{Q}{V} = 2 \sum_n \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} Q_n(\mathbf{k}), \quad (2.2.129)$$

donde la integral es sobre una celda primitiva. Puede mostrarse que si  $Q_n(\mathbf{k})$  depende de  $n$  y  $\mathbf{k}$  sólo a través de la energía  $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ , entonces  $q$  tiene la forma

$$q = \int d\varepsilon g(\varepsilon) Q(\varepsilon). \quad (2.2.130)$$

Comparando 2.2.129 y 2.2.130 encontramos que

$$g(\varepsilon) = \sum_n g_n(\varepsilon), \quad (2.2.131)$$

donde  $g_n(\varepsilon)$ , la densidad de niveles en la banda  $n$ , está dada por

$$g_n(\varepsilon) = \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \delta(\varepsilon - \varepsilon_n(\mathbf{k})), \quad (2.2.132)$$

donde la integral es realizada sobre cualquier celda primitiva.

Una forma alternativa para representar la densidad de niveles puede ser construida notando que

$$g_n(\varepsilon)d\varepsilon = (2/V) \times \left( \begin{array}{l} \text{número de vectores de onda permitidos en la} \\ \text{banda } n \text{ en el rango de energías desde } \varepsilon \text{ a } \varepsilon + d\varepsilon \end{array} \right) \quad (2.2.133)$$

El número de vectores de onda permitidos en la banda  $n$  en este rango de energías es simplemente el volumen de la celda primitiva en el espacio  $k$ , con  $\varepsilon \leq \varepsilon_n(\mathbf{k}) \leq \varepsilon + d\varepsilon$ , dividido por el volumen por vector de onda permitido,  $\Delta\mathbf{k} = (2\pi)^3/V$ . Entonces

$$g_n(\varepsilon)d\varepsilon = \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \times \left\{ \begin{array}{l} 1, \quad \varepsilon \leq \varepsilon_n(\mathbf{k}) \leq \varepsilon + d\varepsilon \\ 0, \quad \text{otherwise} \end{array} \right\} \quad (2.2.134)$$

Debido a que  $d\varepsilon$  es infinitesimal, esto puede ser expresado como una integral de superficie. Sea  $S_n(\varepsilon)$  una porción de la superficie  $\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon$  perteneciente a la celda primitiva, y sea  $\delta k(\mathbf{k})$  la distancia perpendicular entre las superficies  $S_n(\varepsilon)$  y  $S_n(\varepsilon + d\varepsilon)$  en el punto  $\mathbf{k}$ . Luego

$$g_n(\varepsilon)d\varepsilon = \int_{S_n(\varepsilon)} \frac{dS}{4\pi^3} \delta k(\mathbf{k}). \quad (2.2.135)$$

Para encontrar una forma explícita de  $\delta k(\mathbf{k})$  debemos notar que, debido a que  $S_n(\varepsilon)$  es una superficie de energía constante, el gradiente  $k$  de  $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ ,  $\nabla\varepsilon_n(\mathbf{k})$ , es un vector normal a la superficie cuya magnitud es igual a la tasa de cambio de  $\varepsilon_n(\mathbf{k})$  en la dirección normal; es decir,

$$\varepsilon + d\varepsilon = \varepsilon + |\nabla\varepsilon_n(\mathbf{k})|\delta k(\mathbf{k}), \quad (2.2.136)$$

y, por lo tanto,

$$\delta k(\mathbf{k}) = \frac{d\varepsilon}{\nabla \varepsilon_n(\mathbf{k})} \quad (2.2.137)$$

Reemplazando 2.2.137 en 2.2.135, llegamos finalmente a la expresión

$$g_n(\varepsilon) = \int_{S_n(\varepsilon)} \frac{dS}{4\pi^3} \frac{1}{|\nabla \varepsilon_n(\mathbf{k})|}. \quad (2.2.138)$$

la cual es una relación explícita entre la densidad de niveles y la estructura de bandas.

### 2.2.2.18. Método de enlaces fuertes

La aproximación de enlaces fuertes se ocupa del caso en el que el solapamiento de las funciones de onda atómicas es suficiente para requerir correcciones a la imagen de los átomos aislados, pero no tanto como para hacer que la descripción atómica sea completamente irrelevante. La aproximación es muy útil para describir las bandas de energía que surgen de las cáscaras  $d$  parcialmente llenas de los metales de transición y para describir la estructura electrónica de los aislantes.

Para desarrollar la aproximación de enlaces fuertes, asumimos que en la vecindad de cada punto de la red cristalina el Hamiltoniano del cristal periódico  $H$  puede ser aproximado por el Hamiltoniano de un solo átomo ubicado en el punto de la red. Además, asumimos que los niveles ligados del Hamiltoniano atómico están bien localizados, es decir, si  $\psi_n$  es un nivel ligado de  $H_{at}$  para un átomo en el origen, luego requerimos que  $\psi_n(\mathbf{r})$  sea muy pequeño cuando  $r$  supere una distancia del orden de la constante de la red, a lo cual nos referiremos como el “rango” de  $\psi_n$ .

$$H_{at}\psi_n = E_n\psi_n, \quad (2.2.139)$$

En el caso extremo en el cual el Hamiltoniano del cristal comience a diferir de  $H_{at}$  solo a distancias desde  $\mathbf{r} = 0$  que excedan el rango de  $\psi_n(\mathbf{r})$ , la función de onda  $\psi_n(\mathbf{r})$  será una excelente aproximación a los estados estacionarios de la función de onda del Hamiltoniano completo con autovalores  $E_n$ . Por lo tanto, también lo será la función de onda  $\psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})$  para todo  $\mathbf{R}$  en la red de Bravais, ya que  $H$  tiene la periodicidad de la red.

Para calcular este caso extremo, escribimos el Hamiltoniano del cristal  $H$  como

$$H = H_{at} + \Delta U(\mathbf{r}), \quad (2.2.140)$$

donde  $\Delta U(\mathbf{r})$  contiene todas las correcciones del potencial atómico requerido para reproducir el potencial periódico completo del cristal. Si  $\psi_n(\mathbf{r})$  satisface la ecuación de Schrödinger atómica 2.2.139, entonces también lo hará con la ecuación de Schrödinger del cristal 2.2.140, provisto que  $\Delta U(\mathbf{r})$  se anule donde  $\psi_n(\mathbf{r})$  no. Si este es de verdad el caso, entonces cada nivel atómico  $\psi_n(\mathbf{r})$  devolverá  $N$  niveles en el potencial periódico, con funciones de onda  $\psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ , para cada uno de los  $N$  sitios  $\mathbf{R}$  en la red. Para mantener la descripción de Bloch debemos encontrar las  $N$  combinaciones lineales de estas funciones de onda degeneradas que satisfacen la condición de Bloch

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}) \quad (2.2.141)$$

Las  $N$  combinaciones lineales requerimos que sean

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad (2.2.142)$$

donde  $\mathbf{k}$  pasa por los  $N$  valores en la primer zona de Brillouin consistente con la condición de frontera periódica de Born-Von Karman. La condición de Bloch 2.2.141 es verificada por las funciones de onda 2.2.142 notando que

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_n(\mathbf{r} + \mathbf{R} - \mathbf{R}') \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \left[ \sum_{\mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}' - \mathbf{R})}\psi_n(\mathbf{r} + (\mathbf{R}' - \mathbf{R})) \right] \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \left[ \sum_{\mathbf{R}} \psi_n(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{R}}) \right] \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.2.143)$$

Así, las funciones de onda 2.2.142 satisfacen la condición de Bloch con vector de onda  $\mathbf{k}$ , mientras continúan presentando el carácter atómico de los niveles. Las bandas de energía construidas de esta forma tienen poca estructura, ya que,  $\varepsilon_n(\mathbf{k})$  es simplemente la energía del nivel atómico  $E_n$  sin importar el valor de  $\mathbf{k}$ . Para solucionar esto debemos realizar una asunción más realista en la cual  $\psi_n(\mathbf{r})$  se hace pequeña, pero no precisamente cero, antes de que  $\Delta U(\mathbf{r})$  se vuelva apreciable. Esto sugiere que podemos buscar una solución a la ecuación de Schrödinger del cristal completo que mantenga la forma general de 2.2.142

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad (2.2.144)$$

pero que la función  $\phi(\mathbf{r})$  no sea necesariamente una función de onda exacta de estado estacionario atómico. Si el producto  $\Delta U(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r})$  es extremadamente pequeño (pero no cero), podemos esperar que la función  $\phi(\mathbf{r})$  sea muy parecida a la función de onda atómica  $\psi_n(\mathbf{r})$  o a las funciones de onda en la cual  $\psi_n(\mathbf{r})$  es degenerada. Basado en esto, uno puede esperar que la función  $\phi(\mathbf{r})$  se expanda en un cantidad relativamente pequeña de funciones de onda atómicas localizadas:

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_n b_n \psi_n(\mathbf{r}). \quad (2.2.145)$$

Si multiplicamos la ecuación de Schrödinger del cristal

$$H\psi(\mathbf{r}) = (H_{at} + \Delta U(\mathbf{r}))\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{k})\psi(\mathbf{r}) \quad (2.2.146)$$

por la función de onda atómica  $\psi_m^*(\mathbf{r})$ , integramos sobre todo  $\mathbf{r}$ , y utilizamos el hecho de que

$$\int \psi_m^*(\mathbf{r}) H_{at} \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = (H_{at} \psi_m(\mathbf{r}))^* \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = E_m \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.2.147)$$

encontramos que

$$(\varepsilon(\mathbf{k}) - E_m) \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.2.148)$$

Utilizando 2.2.144 y 2.2.145 en 2.2.148 y, además, la condición de ortonormalidad de las funciones de onda atómicas,

$$\int \psi_m^*(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{nm}, \quad (2.2.149)$$

llegamos a una ecuación de autovalores que determina los coeficientes  $b_n(\mathbf{k})$  y las energías de Bloch  $\varepsilon(\mathbf{k})$ :

$$\begin{aligned} (\varepsilon(\mathbf{k}) - E_m) b_m = & - (\varepsilon(\mathbf{k}) - E_m) \sum_n \left( \sum_{\mathbf{R} \neq 0} \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} d\mathbf{r} \right) b_n \\ & + \sum_n \left( \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) d\mathbf{r} \right) b_n \\ & + \sum_n \left( \sum_{\mathbf{R} \neq 0} \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} d\mathbf{r} \right) b_n. \end{aligned} \quad (2.2.150)$$

El primer término del lado derecho contiene la integral  $\int \psi_m^*(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) d\mathbf{r}$  la cual brinda

la hipótesis de niveles atómicos bien localizados si su valor es pequeño comparado con la unidad. Asumimos que la integral del tercer término en el lado derecho es pequeña, debido a que contiene el producto de dos funciones de onda atómicas centradas en diferentes sitios. Por último, asumimos que el segundo término del lado derecho es pequeño debido a que esperamos que las funciones de onda atómicas se vuelvan pequeñas a suficientemente grandes distancias para que el potencial periódico se desvíe apreciablemente del atómico.

Consecuentemente, el lado derecho de la ecuación 2.2.150 es pequeño siempre y, por lo tanto, también será pequeño  $(\varepsilon(\mathbf{k}) - E_m)b_m$ . Esto es posible si  $\varepsilon(\mathbf{k}) - E_m$  es pequeño mientras que  $b_m$  no y viceversa. Así,  $\varepsilon(\mathbf{k})$  debe estar cerca a un nivel atómico, por ejemplo  $E_0$ , y todos los  $b_m$  deben ser pequeños excepto aquellos que vayan con ese nivel y sus niveles degenerados en energía:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \approx E_0, \quad b_m \approx 0 \text{ a menos que } E_m \approx E_0 \quad (2.2.151)$$

Si las estimaciones en 2.2.151 fueran identidades estrictas, volveríamos al caso extremo en el cual los niveles del cristal serían idénticos a los atómicos. Ahora, sin embargo, podemos determinar los niveles del cristal más precisamente con la ayuda de 2.2.151 para estimar el lado derecho de 2.2.150 haciendo que la suma en  $n$  sea solo para aquellos niveles con energías o degeneradas o muy cercanas a  $E_0$ . Si el nivel atómico 0 no se encuentra degenerado, es decir, un nivel  $s$ , entonces 2.2.150 se reduce a una única ecuación dando una expresión explícita para la banda de energía que surge de este nivel  $s$ . Si estamos interesados en las bandas que surgen de un nivel atómico  $p$ , el cual se encuentra triplemente degenerado, entonces 2.2.150 daría tres ecuaciones homogéneas cuyos autovalores otorgarían las  $\varepsilon(\mathbf{k})$  para las tres bandas  $p$ , y cuales soluciones  $b(\mathbf{k})$  brindarían las combinaciones lineales apropiadas de los niveles atómicos  $p$  que componen  $\phi$  a distintos valores de  $\mathbf{k}$  en la zona de Brillouin. Si quisiéramos obtener una banda  $d$  a partir de niveles atómicos  $d$ , deberíamos resolver un sistema de ecuaciones de  $5 \times 5$ , etc.

Realizaremos un ejemplo de una banda  $s$  que surge de un solo nivel atómico  $s$ . Si todos los coeficientes  $b$  en 2.2.150 son cero excepto aquel para un nivel atómico  $s$ , entonces 2.2.150 nos devuelve directamente la estructura de banda correspondiente a una banda  $s$ :

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = E_s - \frac{\beta + \sum \gamma(\mathbf{R})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{1 + \sum \alpha(\mathbf{R})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}, \quad (2.2.152)$$

donde  $E_s$  es la energía del nivel atómico  $s$ , y

$$\beta = - \int d\mathbf{r} \Delta U(\mathbf{r}) |\phi(\mathbf{r})|^2, \quad (2.2.153)$$

$$\alpha(\mathbf{R}) = \int d\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad (2.2.154)$$

$$\gamma(\mathbf{R}) = - \int d\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}). \quad (2.2.155)$$

Los coeficientes 2.2.153 y 2.2.155 pueden simplificarse utilizando algunas simetrías. Debido a que  $\phi$  es un nivel  $s$ ,  $\phi(\mathbf{r})$  es real y depende únicamente de la magnitud de  $r$ . De esto sigue que  $\alpha(-\mathbf{R}) = \alpha(\mathbf{R})$ . Esta es una simetría de inversión de la red de Bravais, la cual requiere que  $\Delta U(-\mathbf{r}) = \Delta U(\mathbf{r})$ , y también implica que  $\gamma(-\mathbf{R}) = \gamma(\mathbf{R})$ . Ignoramos los términos en  $\alpha$  en el denominador de 2.2.152 ya que dan pequeñas correcciones al numerador. Una última simplificación proviene de asumir que solamente los primeros vecinos otorgan integrales de solapamiento apreciables. Poniendo todo esto junto, podemos simplificar 2.2.152 a

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = E_s - \beta - \sum \gamma(\mathbf{R}) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}), \quad (2.2.156)$$

donde la suma se realiza sobre todos aquellos  $\mathbf{R}$  en la red de Bravais que conecten el origen con sus primeros vecinos.

### 2.2.2.19. Funciones de Wannier

Demostraremos que las funciones de Bloch para cualquier banda siempre pueden ser escritas en la forma 2.2.142 en la cual se basa la aproximación de enlaces fuertes. Las funciones  $\phi$  que juegan el papel de funciones de onda atómicas son conocidas como funciones de Wannier. Tales funciones pueden ser definidas para cualquier banda, sean o no bien descritas por la aproximación de enlaces fuertes, aunque las funciones de Wannier tendrán poco parecido con cualquier función de onda electrónica para un átomo aislado.

Para establecer que cualquier función de Bloch  $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  puede ser escrita en la forma 2.2.142, debemos notar que considerada como una función de  $\mathbf{k}$  para  $\mathbf{r}$  fijo,  $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  es periódica en la red recíproca. Entonces tiene una expansión en series de Fourier como ondas planas con vectores de onda en el espacio directo. Así, para un cualquier  $\mathbf{r}$  fijo

podemos escribir

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} f_n(\mathbf{R}, \mathbf{r}) e^{i\mathbf{R}\cdot\mathbf{k}}, \quad (2.2.157)$$

donde los coeficientes en la suma dependen de  $\mathbf{r}$  como también de los “vectores de onda”  $\mathbf{R}$ , ya que para cada  $\mathbf{r}$  es una función diferente de  $\mathbf{k}$  la que es expandida.

Los coeficientes de Fourier 2.2.157 están dados por la función inversa

$$f_n(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \frac{1}{v_0} \int d\mathbf{k} e^{i\mathbf{R}\cdot\mathbf{k}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.2.158)$$

La ecuación 2.2.157 es de la forma 2.2.142, provisto que la función  $f_n(\mathbf{R}, \mathbf{r})$  depende de  $\mathbf{r}$  y  $\mathbf{R}$  solo por su diferencia,  $\mathbf{r} - \mathbf{R}$ . Pero si  $\mathbf{r}$  y  $\mathbf{R}$  son corridos por un vector de la red de Bravais  $R_0$ , entonces  $f$  permanece intacta como consecuencia directa del teorema de Bloch. Así,  $f_n(\mathbf{R}, \mathbf{r})$  tiene la forma

$$f_n(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \quad (2.2.159)$$

A diferencia de las funciones de onda atómicas de la aproximación de enlaces fuertes  $\phi(\mathbf{r})$ , las funciones de Wannier  $\phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})$  en diferentes sitios son ortogonales. Debido a que el conjunto completo de funciones de Bloch pueden ser escritas como combinaciones lineales de las funciones de Wannier, las funciones de Wannier  $\phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})$  para todo  $n$  y  $\mathbf{R}$  forman un conjunto completo ortogonal. Por lo tanto, ofrecen una base alternativa para la descripción de niveles de electrones independientes en un potencial de un cristal.

### 2.2.3. Método de enlaces fuertes en el grafeno

#### 2.2.3.1. Breve introducción al grafeno

Dentro de los sistemas compuesto por átomos de carbono solamente se encuentra el grafeno, un alótropo bidimensional del carbono, el cual desempeña una papel importante en la comprensión de las propiedades electrónicas de otros alótropos. El grafeno está formado por átomos de carbono dispuestos en una estructural de panal (honeycomb) formada por hexágonos, y puede considerarse que está compuesto por anillos de benceno desprovistos de sus átomos de hidrógeno. A pesar de ser la madre de todos los alótropos del carbono y de que probablemente puede ser producido cada vez que alguien escribe con un lápiz, fue aislado luego de más de 400 años desde su invención por Andre Geim y Konstantin Novoselov en 2004. La razón de esto es que en primera instancia nadie esperaba que el grafeno existiera en estado libre y, luego, que no existían herramientas experimentales para buscar de capas de un átomo de espesor entre los restos de lápiz. De esta manera el grafeno es relativamente fácil de producir, pero no de encontrar.

La flexibilidad estructural del grafeno se refleja en sus propiedades electrónicas. La hibridización  $sp^2$  entre un orbital  $s$  y dos orbitales  $p$  conduce a una estructura plana triangular con la formación de un enlace  $\sigma$  entre los átomos de carbono que se encuentran separados por 1.42 Å. El enlace  $\sigma$  está formado por la superposición de dos orbitales atómicos a lo largo del eje de enlace, y es responsable de la solidez de la estructura en todos los alótropos. Debido al principio de exclusión de Pauli estas bandas tienen las capas llenas y, por lo tanto, forman una banda de valencia profunda. El orbital  $p$  que no es afectado, el cual es perpendicular a la estructura plana, puede unirse covalentemente con los átomos de carbono vecinos dando lugar a la formación de una banda  $\pi$  y, dado que cada orbital  $p$  tiene un electrón adicional, la banda  $\pi$  está medio llena. Se denomina enlace  $\pi$  a la superposición de dos orbitales atómicos por encima y por debajo del eje de enlace.

Uno de los aspectos más interesantes del grafeno es que sus excitaciones de baja energía se comportan como fermiones de Dirac sin masa y con quiralidad. En el grafeno neutro, el potencial químico cruza exactamente el punto de Dirac. Esta dispersión particular, que sólo es válida a bajas energías, imita la física de la electrodinámica cuántica (QED en por sus siglas en inglés) para fermiones sin masa, excepto por el hecho de que en el grafeno los fermiones de Dirac se mueven con una velocidad  $v_F$ ,

que es 300 veces menor que la velocidad de la luz  $c$ . Por lo tanto, muchas de las propiedades inusuales de QED pueden aparecer en el grafeno pero a velocidades mucho menores.

El grafeno es único en el sentido de que comparte propiedades de las membranas flexibles y al mismo tiempo se comporta de forma metálica, de modo que los fermiones de Dirac se propagan en un espacio espacio curvo. De esto surgen analogías con problemas de gravedad cuántica.

Aunque el campo de estudio del grafeno está aún en sus inicios, las posibilidades científicas y tecnológicas de este nuevo material parecen ilimitadas haciendo que la comprensión y el control de sus propiedades puedan abrir puertas a una nueva frontera en la electrónica.

### 2.2.3.2. Estructura de bandas del grafeno en primera cuantización

El espaciamiento de la red del grafeno es de  $a = 1.42 \text{ \AA}$ . Además, el grafeno posee cuatro electrones de valencia de los cuales tres forman enlaces fuertes con sus átomos vecinos en el plano, con funciones de onda

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(\psi_c(2s) + \sqrt{2}\psi_c(\sigma_i 2p)), \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.2.160)$$

donde  $\psi_c(2s)$  es la función de onda  $2s$  para el carbono y  $\psi_c(\sigma_i 2p)$  son las funciones de onda  $2p$  cuyos ejes se encuentran en la dirección  $\sigma_i$  que une los átomos del grafeno con sus tres vecinos en el plano. El cuarto electrón se considera que está en el estado  $2p_z$ , cuyo eje de simetría se encuentra perpendicular al plano. Los tres electrones que forman enlaces coplanares no contribuirán a la conductividad, y trataremos al grafeno con un único electrón de conducción en el estado  $2p_z$ .

La celda unidad de la red hexagonal presenta dos átomos inequivalentes,  $A$  y  $B$ . Los vectores primitivos de la red directa son

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2} (3, \sqrt{3}), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2} (3, -\sqrt{3}). \quad (2.2.161)$$

Con estos valores podemos calcular los vectores primitivos recíprocos utilizando la expresión [2.2.89](#)

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} (1, \sqrt{3}), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} (1, -\sqrt{3}). \quad (2.2.162)$$

Además, hay dos puntos de particular importancia en el grafeno  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  en las esquinas de la zona de Brillouin. Estos puntos se denominan puntos de Dirac por razones que se mostrarán más adelante. Sus posiciones en el espacio  $k$  están dadas por:

$$\mathbf{K} = \left( \frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right), \quad \mathbf{K}' = \left( \frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right). \quad (2.2.163)$$

Los vectores en el espacio directo de los tres primeros vecinos son

$$\delta_1 = \frac{a}{2} (1, \sqrt{3}), \quad \delta_2 = \frac{a}{2} (1, -\sqrt{3}), \quad \delta_3 = -a (1, 0) \quad (2.2.164)$$

Ahora consideremos el método de enlaces fuertes. Si  $\chi(\mathbf{r})$  es la función de onda del

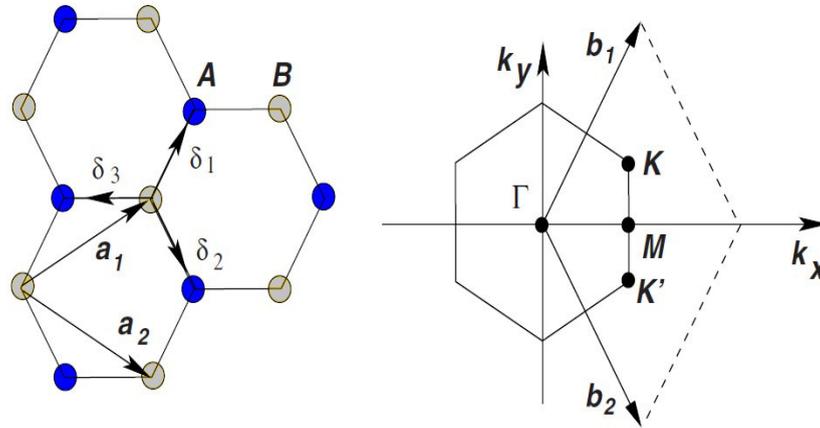


FIGURA 2.6: Izquierda: Red de panal (honeycomb) del grafeno. Derecha: primera zona de Brillouin, los puntos de Dirac se encuentran en  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$ .

orbital  $2p_z$  normalizada para un átomo aislado, entonces la función de onda para el método de enlaces fuertes es

$$\psi = \varphi_1 + \lambda \varphi_2$$

$$\psi = \sum_{R_A} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_A} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) + \lambda \sum_{R_B} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_B} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B). \quad (2.2.165)$$

donde la primera suma corre sobre los vectores posición de los sitios  $A$  y la segunda sobre los vectores posición de los sitios  $B$ .

Por el método variacional es conocido que el mejor valor de  $E$  para esta aproximación se obtiene multiplicando la función de onda 2.2.165 por  $\varphi_1$  y  $\varphi_2$  respectivamente, integramos y luego eliminamos  $\lambda$  de las dos ecuaciones resultantes.

Descartaremos la superposición de las funciones de onda  $p_z$  centrada en otros átomos, es decir, asumimos que

$$\chi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A)\chi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B)d\mathbf{r} = 0 \quad (2.2.166)$$

Luego, substituyendo 2.2.165 en

$$H\psi = E\psi \quad (2.2.167)$$

y, haciendo los pasos mencionados previamente, obtenemos

$$H_{11} + \lambda H_{12} = ES, \quad (2.2.168)$$

$$H_{21} + \lambda H_{22} = \lambda ES, \quad (2.2.169)$$

donde

$$H_{11} = \int \varphi_1^* H \varphi_1 d\mathbf{r}, \quad H_{12} = H_{21} = \int \varphi_1^* H \varphi_2 d\mathbf{r}, \quad H_{22} = \int \varphi_2^* H \varphi_2 d\mathbf{r} \quad (2.2.170)$$

y

$$S = \int \varphi_1^* \varphi_1 d\mathbf{r} = \int \varphi_2^* H \varphi_2 d\mathbf{r}. \quad (2.2.171)$$

Ahora eliminando  $\lambda$  obtenemos la ecuación

$$\begin{vmatrix} H_{11} - ES & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} - ES \end{vmatrix} = 0 \quad (2.2.172)$$

con la cual encontramos los valores la energía

$$E = \frac{1}{2S} [H_{11} + H_{22} \pm \sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4|H_{12}|^2}]. \quad (2.2.173)$$

Debido a que descartamos las integrales de superposición,  $S = N$ , el número de celdas unidad en el cristal, y por simetría  $H_{11} = H_{22}$  tenemos, finalmente

$$E = \frac{1}{N} H_{11} \pm \frac{1}{N} |H_{12}|. \quad (2.2.174)$$

El signo positivo actuará por fuera de la zona hexagonal, y el signo negativo por dentro. La discontinuidad de la energía a través de la frontera es

$$\Delta E = \frac{2}{N} |H_{12}| \quad (2.2.175)$$

Ahora calcularemos  $H_{11}$ ,  $H_{22}$  y  $H_{12}$ .

$$H_{11} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}_A, \mathbf{R}_{A'}} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_{A'})} \int \chi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) H \chi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A'}) d\mathbf{r}. \quad (2.2.176)$$

Considerando solo las integrales de intercambio de los primeros vecinos de los átomos  $A$ , y escribiendo

$$E_0 = \int \chi^*(\mathbf{r}) H \chi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (2.2.177)$$

$$\gamma'_0 = - \int \chi^*(\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}') H \chi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (2.2.178)$$

donde  $\boldsymbol{\rho}' = \mathbf{a}_1$  (por ejemplo) es el vector entre átomos  $A$  a primeros vecinos con posiciones  $\mathbf{R}_1 = \mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{R}_2 = -\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{R}_3 = \mathbf{a}_2$ ,  $\mathbf{R}_4 = -\mathbf{a}_2$ ,  $\mathbf{R}_5 = \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$  y  $\mathbf{R}_6 = \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1$ , podemos desarrollar la siguiente expresión

$$\begin{aligned} NH_{11} &= E_0 - \gamma'_0 \{ e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_1} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_2} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_3} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_4} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_5} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_6} \} \\ &= E_0 - \gamma'_0 \left\{ \left( e^{-i\frac{\sqrt{3}a}{2}k_y} + e^{i\frac{\sqrt{3}a}{2}k_y} \right) \left( e^{-i\frac{3a}{2}k_x} + e^{i\frac{3a}{2}k_x} \right) + \left( e^{-i\sqrt{3}ak_y} + e^{i\sqrt{3}ak_y} \right) \right\} \\ &= E_0 - \gamma'_0 \left\{ 2 \cos \left( \sqrt{3}ak_y \right) + 4 \cos \left( \frac{\sqrt{3}a}{2}k_y \right) \cos \left( \frac{3a}{2}k_x \right) \right\} \end{aligned}$$

Si escribimos el Hamiltoniano como

$$H = H_{at} + (H - H_{at}) = H_{at} + \Delta U \quad (2.2.179)$$

donde  $H_{at}$  es el Hamiltoniano para un átomo de carbono aislado y  $(H - H_{at}) = \Delta U = V - U$  en donde  $V$  es el potencial periódico de la red y  $U$  es el potencial de un átomo aislado, entonces debido a que  $H_{at}\chi = E_0\chi$

$$E_0 = \bar{E} - \int \chi^*(\mathbf{r})(U - V)\chi(\mathbf{r})d\mathbf{r}, \quad (2.2.180)$$

y

$$\gamma'_0 = \bar{E} - \int \chi^*(\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}')(U - V)\chi(\mathbf{r})d\mathbf{r}, \quad (2.2.181)$$

$E_0$  es la energía de un electrón en el estado  $2p_z$  en el carbono.

Ahora calcularemos  $H_{12}$ . Para esto, consideraremos solamente las interacciones entre primeros vecinos en la red, siendo los primeros vecinos de los átomos tipo  $A$  siempre átomos de tipo  $B$  y viceversa. Escribimos

$$\gamma_0 = \bar{E} - \int \chi^*(\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho})(U - V)\chi(\mathbf{r})d\mathbf{r}, \quad (2.2.182)$$

donde  $\rho = \delta_1$  (por ejemplo), entonces obtenemos

$$\begin{aligned}
 H_{12} &= \frac{1}{N} \gamma_0 \{ e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_2} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_3} \} \\
 &= \frac{1}{N} \gamma_0 e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_3} \{ 1 + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\delta_1-\delta_3)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\delta_2-\delta_3)} \} \\
 &= \frac{1}{N} \gamma_0 e^{-iak_x} \left\{ 1 + e^{-i\frac{3a}{2}k_x} \left( e^{-i\frac{\sqrt{3}a}{2}k_y} + e^{i\frac{\sqrt{3}a}{2}k_y} \right) \right\} \\
 &= \frac{1}{N} \gamma_0 e^{-iak_x} \left\{ 1 + 2e^{-i\frac{3a}{2}k_x} \cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_y\right) \right\}
 \end{aligned}$$

luego

$$\begin{aligned}
 |H_{12}|^2 &= \frac{\gamma_0^2}{N^2} \left\{ 1 + 2e^{-i\frac{3a}{2}k_x} \cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_y\right) \right\} \left\{ 1 + 2e^{i\frac{3a}{2}k_x} \cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_y\right) \right\} \\
 &= \frac{\gamma_0^2}{N^2} \left\{ 1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_y\right) \cos\left(\frac{3a}{2}k_x\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_y\right) \right\}
 \end{aligned}$$

utilizando la identidad  $\cos(2x) = \cos^2(x) - \sin^2(x)$  se obtiene que  $4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_y\right) = 2 + 2 \cos(\sqrt{3}ak_y)$ , entonces

$$|H_{12}| = \frac{\gamma_0}{N} \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}ak_y) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_y\right) \cos\left(\frac{3a}{2}k_x\right)}. \quad (2.2.183)$$

Finalmente, escribiendo

$$f(\mathbf{k}) = 2 \cos(\sqrt{3}ak_y) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_y\right) \cos\left(\frac{3a}{2}k_x\right). \quad (2.2.184)$$

La energía 2.2.174 vale

$$E(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \left\{ E_0 - \gamma'_0 f(\mathbf{k}) \pm \gamma_0 \sqrt{3 + f(\mathbf{k})} \right\}. \quad (2.2.185)$$

donde  $\gamma_0 (\approx 2.8\text{eV})$  es la energía de salto a primeros vecinos entre diferentes subredes, y  $\gamma'_0 (0.02\gamma_0 \lesssim \gamma'_0 \lesssim 0.2\gamma_0)$  es la energía de salto a segundos vecinos en la misma subred.

Podemos observar que el espectro de energías es simétrico respecto a la energía cero si  $\gamma'_0 = 0$ , mientras que para valores distintos de  $\gamma'_0$  se rompe la simetría electrón-hueco y las bandas se vuelven asimétricas. Sin embargo, en nuestro análisis vamos a estudiar el espectro a primeros vecinos ( $\gamma'_0 = 0$ ) y, además, eliminaremos la energía  $E_0$  ya que al ser una constante no cambia la estructura del espectro. Lo mismo sucede

con el número de celdas unidad en el cristal  $N$ . Entonces

$$E(\mathbf{k}) = \pm \gamma_0 \sqrt{3 + f(\mathbf{k})}. \quad (2.2.186)$$

### 2.2.3.3. Estructura de bandas del grafeno en segunda cuantización

Ahora trabajaremos directamente en segunda cuantización, y definiremos los operadores de creación y aniquilación de un electrón en el orbital más bajo centrado en los átomos  $A$  y  $B$  con las relaciones de anticonmutación:

$$\begin{aligned} \{A(\mathbf{R}), A^\dagger(\mathbf{R}')\} &= \{B(\mathbf{R}), B^\dagger(\mathbf{R}')\} = \delta_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \\ \{A(\mathbf{R}), A(\mathbf{R}')\} &= \{B(\mathbf{R}), B(\mathbf{R}')\} = 0 \\ \{A(\mathbf{R}), B(\mathbf{R}')\} &= \{A(\mathbf{R}), B^\dagger(\mathbf{R}')\} = 0. \end{aligned} \quad (2.2.187)$$

Debemos notar que los primeros vecinos de un átomo tipo  $A$  es un átomo tipo  $B$  y viceversa. Por lo tanto, podemos escribir el Hamiltoniano para el método de enlaces fuertes como:

$$\begin{aligned} H &= -t \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle} A^\dagger(\mathbf{R})B(\mathbf{R}') + A(\mathbf{R})B^\dagger(\mathbf{R}') \\ &= -t \sum_{\mathbf{R}, \delta} A^\dagger(\mathbf{R})B(\mathbf{R} + \delta) + A(\mathbf{R})B^\dagger(\mathbf{R} + \delta). \end{aligned} \quad (2.2.188)$$

Debido a la invariancia traslacional del sistema, utilizaremos el espacio de Fourier para escribir

$$\begin{aligned} A(\mathbf{R}) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in BZ} A(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \\ B(\mathbf{R}) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in BZ} B(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \end{aligned} \quad (2.2.189)$$

Al igual que los operadores en el espacio real, las relaciones de anticonmutación que no se anulan son

$$\{A(\mathbf{k}), A^\dagger(\mathbf{k}')\} = \{B(\mathbf{k}), B^\dagger(\mathbf{k}')\} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}. \quad (2.2.190)$$

Utilizando esto en el Hamiltoniano, tenemos

$$\begin{aligned} H &= -\frac{t}{N} \sum_{\mathbf{R}, \delta} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \delta} e^{i\mathbf{R} \cdot (\mathbf{q} - \mathbf{k})} A^\dagger(\mathbf{k})B(\mathbf{q}) + h.c. \\ &= -t \sum_{\delta} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \delta} A^\dagger(\mathbf{k})B(\mathbf{q}) \left( \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{R} \cdot (\mathbf{q} - \mathbf{k})} \right) + h.c. \end{aligned} \quad (2.2.191)$$

Utilizando el hecho de que  $(\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{R} \cdot (\mathbf{q}-\mathbf{k})}) = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{k}}$ , obtenemos

$$H = -t \sum_{\mathbf{k},\delta} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta} A^\dagger(\mathbf{k}) B(\mathbf{q}) + h.c. \quad (2.2.192)$$

Definiendo  $\psi(\mathbf{k}) = (A(\mathbf{k}), B(\mathbf{k}))^T$ , podemos escribir el Hamiltoniano como

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \psi^\dagger(\mathbf{k}) h(\mathbf{k}) \psi(\mathbf{k}), \quad (2.2.193)$$

donde la matriz  $h$ , denominada Hamiltoniano de Bloch, toma la forma

$$h(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & \Delta(\mathbf{k}) \\ \Delta^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \quad (2.2.194)$$

con  $\Delta(\mathbf{k}) = -t \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta} = -t e^{-iak_x} \left\{ 1 + 2e^{i\frac{3a}{2}k_x} \cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_y\right) \right\}$ . Para encontrar el espectro de energías debemos tomar el determinante de la matriz  $h$ , entonces

$$E(\mathbf{k}) = \pm t \sqrt{\Delta^*(\mathbf{k}) \Delta(\mathbf{k})} = \pm t \sqrt{3 + f(\mathbf{k})} \quad (2.2.195)$$

donde  $f(\mathbf{k})$  es igual a [2.2.184](#).

#### 2.2.3.4. Física de Dirac emergente

Existen dos bandas sin “gap” que se tocan en los puntos de Dirac  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$ , es decir, estos puntos se encuentran en el espacio  $k$  cuando  $E(\mathbf{k}) = 0$ . Estas bandas deben tocarse en puntos dentro de la primera zona de Brillouin. Además, el grafeno tiene un electrón accesible por átomo y, tomando en cuenta el spin, nos damos cuenta que la banda inferior se encuentra completamente llena. Entonces, si queremos describir las pequeñas excitaciones del estado base, las excitaciones que contribuirán son aquellas que se encuentran en las cercanías de estos puntos.

Primero debemos determinar en qué posición se encuentran estos puntos. Es decir, de [2.2.195](#) igualado a cero, tenemos

$$\begin{aligned} \cos(k_x a) + 2 \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}a k_y}{2}\right) &= 0, \\ -\sin(k_x a) + 2 \sin\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}a k_y}{2}\right) &= 0, \end{aligned} \quad (2.2.196)$$

Manipulando algebraicamente

$$\sin\left(\frac{k_x a}{2}\right) \left( -\cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) + \cos\left(\frac{\sqrt{3} a k_y}{2}\right) \right) = 0 \quad (2.2.197)$$

Así, tenemos dos opciones: hacer  $\sin(k_x a/2) = 0$  o hacer  $\cos(k_x a/2) = \cos\left(\frac{\sqrt{3} a k_y}{2}\right)$ . La primera opción nos da  $\left(0, \pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}\right)$  más un vector de la red recíproca cualquiera. La segunda opción da  $\pm \frac{2\pi}{3a} \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right)$  y  $\pm \frac{2\pi}{3a} \left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$  otra vez más un vector de la red recíproca cualquiera.

Todos estos puntos caen en las esquinas de la primera zona de Brillouin. Convencionalmente se adoptan  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  como

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{3a} \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right), \quad \mathbf{K}' = \frac{2\pi}{3a} \left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right) \quad (2.2.198)$$

Debemos recordar que las bandas de energía se cruzan en estos puntos. Debido a esto, existen dos ramas de excitaciones de baja energía: una de excitaciones con un momento dado cerca a  $\mathbf{K}$  y otra cerca a  $\mathbf{K}'$ . Por lo tanto, si queremos centrarnos en la física de baja energía, debemos expandir el Hamiltoniano alrededor de estos puntos. Expandimos a primer orden alrededor de  $\mathbf{K}$ , por ejemplo, obtenemos

$$\begin{aligned} \Delta(\mathbf{K} + \mathbf{q}) &= -t e^{-ik_x a} e^{-iq_x a} \left( 1 + 2 e^{i\frac{3}{2}k_x a} e^{i\frac{3}{2}q_x a} \cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_y + \frac{\sqrt{3}a}{2}q_y\right) \right) \\ &= -t e^{-i\frac{2\pi}{3}} e^{-iq_x a} \left( 1 + 2 e^{i\pi} e^{i\frac{3}{2}q_x a} \cos\left(\frac{\pi}{3} + \frac{\sqrt{3}a}{2}q_y\right) \right) \\ &\approx -t e^{-i\frac{2\pi}{3}} (1 - iaq_x) \left( 1 - 2 \left( \frac{1}{2} - \frac{3}{4}aq_y + i\frac{3}{4}aq_x - i\frac{9}{8}a^2q_xq_y \right) \right) \end{aligned}$$

eliminando términos de orden superior y realizando algo de álgebra

$$\begin{aligned} \Delta(\mathbf{K} + \mathbf{q}) &\approx -\frac{3ta}{2} e^{-i\frac{2\pi}{3}} (q_x + iq_y) \\ \Delta^*(\mathbf{K} + \mathbf{q}) &\approx -\frac{3ta}{2} e^{i\frac{2\pi}{3}} (q_x - iq_y) \end{aligned} \quad (2.2.199)$$

Así, el Hamiltoniano de Bloch y el espectro de energías son

$$h(\mathbf{K} + \mathbf{q}) \approx -\frac{3ta}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\frac{2\pi}{3}} (q_x + iq_y) \\ e^{i\frac{2\pi}{3}} (q_x - iq_y) & 0 \end{pmatrix} \quad (2.2.200)$$

$$E(\mathbf{K} + \mathbf{q}) \approx \pm \frac{3ta}{2} |\mathbf{q}| \quad (2.2.201)$$

Al cambiar las fases de  $A$  y  $B$ , lo que significa cambiar la fase de las funciones de onda, la matriz de Bloch y la energía pueden ser expresadas en la forma

$$\begin{aligned} h(\mathbf{K} + \mathbf{q}) &\approx \hbar v_F \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ E(\mathbf{K} + \mathbf{q}) &\approx \pm \hbar v_F |\mathbf{q}| \end{aligned} \quad (2.2.202)$$

donde  $\boldsymbol{\sigma}$  son las matrices de Pauli. Este es precisamente el Hamiltoniano 2D de fermiones de Dirac sin masa, la cual describe electrones relativistas, y donde la velocidad de la luz es reemplazada por  $v_F = 3ta/2\hbar$ .

Debemos notar que la fase de la función de onda cambia por  $\pi$  a medida que  $\mathbf{q}$  da una vuelta alrededor del origen, y un ciclo completo cuando  $\mathbf{q}$  completa dos vueltas alrededor del origen.

Además, es importante mencionar que la teoría efectiva de Dirac encontrada no es algo artificial generado por la aproximación a primeros vecinos sino que puede ser observada en experimentos y, de hecho, ha sido medida satisfactoriamente.

Finalmente, nuestro problema a gran escala comenzó con electrones no relativistas y obtuvimos que la física de baja energía a niveles microscópicos corresponde a fermiones relativistas sin masa.

## 2.2.4. Ecuación de Dirac

### 2.2.4.1. Ecuación de Dirac en espacio plano

Uno de los requisitos para una formulación relativista de la mecánica cuántica es que la función de onda asociada sea invariante de Lorentz. La ecuación de Schrödinger es de primer orden en la derivada temporal y de segundo orden en las derivadas espaciales. Debido a esto, dicha ecuación no es invariante de Lorentz y, por lo tanto, no puede describir partículas relativistas. La invariancia de la ecuación de Schrödinger bajo transformaciones de Lorentz es una consecuencia de su construcción a partir de la relación no relativista entre la energía de una partícula libre y su momento lineal (utilizando  $\hbar = 1$ )

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (2.2.203)$$

El primer intento para construir una teoría cuántica relativista se basó en la ecuación de Klein-Gordon. Tal ecuación se obtiene de escribir la relación energía-momento de Einstein (utilizando  $c = 1$ )

$$E^2 = \mathbf{p}^2 + m^2 \quad (2.2.204)$$

como operadores que actúan sobre la función de onda,

$$\hat{E}^2\psi(\mathbf{x}, t) = \hat{p}^2\psi(\mathbf{x}, t) + m^2\psi(\mathbf{x}, t) \quad (2.2.205)$$

Utilizando los operadores momento  $\hat{p} = -i\nabla$  y energía  $\hat{E} = i\frac{\partial}{\partial t}$ , llegamos a la ecuación de onda de Klein-Gordon

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = \nabla^2\psi - m^2\psi \quad (2.2.206)$$

La ecuación de Klein-Gordon es ahora invariante de Lorentz y tiene soluciones de ondas planas

$$\psi(\mathbf{x}, t) = Ne^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - Et)} \quad (2.2.207)$$

donde la energía satisface la relación energía-momento de Einstein  $E = \pm\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$ .

En mecánica cuántica las soluciones de energía negativa no pueden ser dejadas de lado ya que deben formar un conjunto completo de estados, pero recordando que la densidad de probabilidad depende de la energía

$$\rho = 2|N|^2 E \quad (2.2.208)$$

vemos que existe una inconsistencia debido a la existencia de probabilidades negativas, por lo tanto, la ecuación de Klein-Gordon no puede ser una teoría consistente para partículas relativistas.

Debido al problema con la densidad de probabilidad, Paul Dirac en el año 1928 encontró una formulación alternativa para obtener una teoría relativista de la mecánica cuántica. Tal formulación no solo solucionó el problema de la densidad de probabilidad sino que también brindó una descripción natural para el spin intrínseco de fermiones con spin semi-entero.

Dirac buscó una ecuación de onda que sea de primer orden en las derivadas tanto espaciales como temporales,

$$\hat{E}\psi = (\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \beta m)\psi \quad (2.2.209)$$

Al elevar al cuadrado la ecuación anterior se pueden obtener las condiciones que deben satisfacer  $\alpha$  y  $\beta$ ,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = & \alpha_x^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \alpha_y^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \alpha_z^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - \beta^2 m^2 \psi \\ & + (\alpha_x \alpha_y + \alpha_y \alpha_x) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} + (\alpha_y \alpha_z + \alpha_z \alpha_y) \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial z} + (\alpha_z \alpha_x + \alpha_x \alpha_z) \frac{\partial^2 \psi}{\partial z \partial x} \\ & + i(\alpha_x \beta + \beta \alpha_x) \frac{\partial \psi}{\partial x} + i(\alpha_y \beta + \beta \alpha_y) \frac{\partial \psi}{\partial y} + i(\alpha_z \beta + \beta \alpha_z) \frac{\partial \psi}{\partial z} \end{aligned}$$

que debe reducirse a la ecuación de Klein-Gordon

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - m^2 \psi \quad (2.2.210)$$

y, entonces, los coeficientes  $\alpha$  y  $\beta$  deben cumplir

$$\begin{aligned} \alpha_x^2 = \alpha_y^2 = \alpha_z^2 = \beta^2 = \mathbf{I} \\ \alpha_j \beta + \beta \alpha_j = 0 \\ \alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j = 0, \quad (j \neq k) \end{aligned} \quad (2.2.211)$$

donde  $\mathbf{I}$  representa la unidad. Las relaciones de anticonmutación no pueden satisfacerse si  $\alpha_i$  y  $\beta$  son números normales. El objeto matemático más simple que cumpla con tales relaciones son las matrices. Debido a las propiedades cíclicas de las trazas,  $\text{Tr}(ABC) = \text{Tr}(BCA)$  y del requisito que  $\beta^2 = \mathbf{I}$  y  $\alpha_i \beta = -\beta \alpha_i$ , se puede mostrar que

tales matrices deben tener traza igual a cero

$$\text{Tr}(\alpha_i) = \text{Tr}(\alpha_i \beta \beta) = \text{Tr}(\beta \alpha_i \beta) = -\text{Tr}(\alpha_i \beta \beta) = -\text{Tr}(\alpha_i) \quad (2.2.212)$$

Además, los autovalores de las matrices  $\alpha_i$  y  $\beta$  son  $\pm 1$  ( $\alpha_i^2 X = \lambda^2 X \rightarrow X = \lambda^2 X$ ). Debido a que la suma de los autovalores de una matriz es igual a su traza y a que los posibles autovalores son  $\pm 1$ , la única forma de que la traza pueda ser cero es que  $\alpha_i$  y  $\beta$  sean matrices de dimensión par. Por último, debido a que el Hamiltoniano de Dirac debe ser Hermítico para poder tener autovalores reales, las matrices  $\alpha$  y  $\beta$  deben también ser Hermíticas,

$$\alpha_x = \alpha_x^\dagger, \quad \alpha_y = \alpha_y^\dagger, \quad \alpha_z = \alpha_z^\dagger \quad \text{y} \quad \beta = \beta^\dagger \quad (2.2.213)$$

Por lo tanto,  $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$  y  $\beta$  son cuatro matrices Hermíticas mutuamente anticonmutativas de dimensión par y con traza cero. Ya que solo existen tres matrices  $2 \times 2$  mutuamente anticonmutativas (matrices de Pauli), la dimensión mínima de las matrices  $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$  y  $\beta$  es  $4 \times 4$ . La elección convencional es la representación de Dirac-Pauli,

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & -\mathbf{I} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.2.214)$$

con

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Esta es una posible representación de las matrices  $\alpha$  y  $\beta$ . Las predicciones físicas de la ecuación de Dirac no dependen de una representación específica sino del álgebra que satisfacen las matrices (álgebra de Clifford).

Como se comentó anteriormente, la ecuación de Dirac también predice el momento angular intrínseco de partículas con spin semi-entero. Podemos probarlo comenzando con la ecuación para un observable dependiente del tiempo correspondiente a un operador  $\hat{O}$

$$\frac{dO}{dt} = \frac{d}{dt} \langle \hat{O} \rangle = i \langle \psi | [\hat{H}, \hat{O}] | \psi \rangle \quad (2.2.215)$$

en donde si el operador para un observable conmuta con el Hamiltoniano del sistema, entonces es una constante del movimiento. El Hamiltoniano de la ecuación de

Schrödinger para una partícula libre

$$\hat{H}_{SE} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \quad (2.2.216)$$

conmuta con el operador de momento angular  $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{p}}$  y, por lo tanto, el momento angular es una cantidad conservada de la mecánica cuántica no relativista. Para el Hamiltoniano de una partícula libre en la ecuación de Dirac, la correspondiente relación de conmutación para la componente  $x$  es

$$[\hat{H}_D, \hat{\mathbf{L}}_x] = \alpha_y [\hat{p}_y, \hat{y}] \hat{p}_z - \alpha_z [\hat{p}_z, \hat{z}] \hat{p}_y = -i(\boldsymbol{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}})_x \quad (2.2.217)$$

donde vemos que el momento angular “orbital” no conmuta con el Hamiltoniano de Dirac y, entonces, no es una cantidad conservada.

Ahora consideremos un operador matricial  $\hat{\mathbf{S}}$   $4 \times 4$  formado con las matrices de spin de Pauli,

$$\hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2} \hat{\boldsymbol{\Sigma}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \quad (2.2.218)$$

el cual tiene una relación de conmutación con  $\hat{H}_D$  igual a

$$[\hat{H}_D, \hat{\mathbf{S}}] = i\boldsymbol{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}} \quad (2.2.219)$$

De lo cual nos podemos dar cuenta que la suma  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$  conmuta con el Hamiltoniano de Dirac

$$[\hat{H}_D, \hat{\mathbf{J}}] = [\hat{H}_D, \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}] = 0 \quad (2.2.220)$$

y, por lo tanto, el operador momento angular total  $\hat{\mathbf{J}}$  es una cantidad conservada.

Con esto, tenemos las herramientas necesarias para probar que una partícula que satisface la ecuación de Dirac tiene momento angular intrínseco  $s = \frac{1}{2}$ :

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \frac{1}{4} (\hat{\Sigma}_x^2 + \hat{\Sigma}_y^2 + \hat{\Sigma}_z^2) = \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\mathbf{S}}^2 \psi = s(s+1)\psi = \frac{3}{4}\psi \rightarrow s = \frac{1}{2} \quad (2.2.221)$$

Como observación final, el Hamiltoniano de Dirac en 2D sin masa se puede expresar como

$$\hat{H}_D = \hbar c(\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}) = \hbar c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \quad (2.2.222)$$

que es casi idéntico a la matriz de Bloch 2.2.202 con la diferencia de que se debe reemplaza la velocidad de Fermi  $v_F$  por la velocidad de la luz  $c$  y se debe transformar  $\mathbf{q} \rightarrow -i\nabla$ .

### 2.2.4.2. Forma covariante de la ecuación de Dirac

Hasta ahora la ecuación de Dirac se ha expresado en términos de las matrices  $\alpha$  y  $\beta$ , lo cual muestra la conexión con el spin. De todas formas, la ecuación de Dirac es usualmente expresada en una forma que muestre su covariancia. Esto puede lograrse pre-multiplicando la ecuación de Dirac por  $\beta$

$$i\beta\alpha_x \frac{\partial\psi}{\partial x} + i\beta\alpha_y \frac{\partial\psi}{\partial y} + i\beta\alpha_z \frac{\partial\psi}{\partial z} + i\beta \frac{\partial\psi}{\partial t} - \beta^2 m\psi = 0 \quad (2.2.223)$$

Ahora definimos las matrices  $\gamma$  de Dirac

$$\gamma^0 \equiv \beta, \quad \gamma^1 \equiv \beta\alpha_x, \quad \gamma^2 \equiv \beta\alpha_y \quad \mathbf{y} \quad \gamma^3 \equiv \beta\alpha_z \quad (2.2.224)$$

usando  $\beta^2 = \mathbf{I}$ , etiquetando las cuatro matrices  $\gamma$  por el índice  $\mu$ , de tal manera que  $\gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2, \gamma^3)$ , y utilizando la definición de la derivada covariante  $\partial_\mu \equiv (\partial_0, \partial_1, \partial_2, \partial_3) \equiv \left( \frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$ , la ecuación de Dirac puede ser expresada en su forma covariante

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi = 0 \quad (2.2.225)$$

con el índice  $\mu$  tratado como un índice de Lorentz para un cuadrivector y la suma implícita sobre índices repetidos.

Las propiedades de las matrices  $\gamma$  pueden obtenerse de las propiedades de las matrices  $\alpha$  y  $\beta$ , las cuales se pueden resumir en una expresión

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} \equiv \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2 g^{\mu\nu} \quad (2.2.226)$$

La matriz  $\gamma^0$  es hermítica mientras que las otras tres matrices son anti-hermíticas, por ejemplo,

$$\gamma^{1\dagger} = (\beta\alpha_x)^\dagger = \alpha_x^\dagger \beta^\dagger = \alpha_x \beta = -\beta\alpha_x = -\gamma^1 \quad (2.2.227)$$

entonces

$$\gamma^{0\dagger} = \gamma^0 \quad \text{y} \quad \gamma^{k\dagger} = -\gamma^k \quad (2.2.228)$$

### 2.2.4.3. Ecuación de Dirac en espacio curvo

Comenzaremos con el formalismo del vielbein de  $n$  componentes, también denominado  $n$ -bein. Si  $\{x^\mu\}$  son coordenadas locales en un espacio-tiempo  $M$  luego  $\{dx^\mu\}$  es el conjunto de uno-formas coordenadas base del espacio cotangente ( $T^*M$  es el espacio vectorial dual al espacio tangente  $TM$ ). El elemento de línea para el espacio-tiempo  $n$ -dimensional  $M$  se puede expresar en coordenadas locales como

$$ds^2 = g_{\mu\nu}(x)dx^\mu dx^\nu \quad (2.2.229)$$

En lugar de trabajar en una base coordenada, es conveniente trabajar en un marco de referencia ortonormal local que tiene como base uno-formas  $\omega^a(x)$  y como elemento de línea

$$ds^2 = \eta_{ab}\omega^a(x)\omega^b(x) \quad (2.2.230)$$

donde  $\eta_{ab}$  puede ser el tensor métrico de Minkowski. Se utilizarán índices latinos para distinguir las componentes de los tensores en un marco de referencia ortonormal local, e índices griegos para las componentes en una base coordenada. Debido a que ambos  $\{dx^\mu\}$  y  $\omega^a(x)$  generan  $T^*M$ , debe ser posible expresar

$$\omega^a(x) = e^a_\mu(x)dx^\mu \quad (2.2.231)$$

para ciertos coeficientes  $e^a_\mu(x)$ . Llamaremos  $e^a_\mu(x)$  como  $n$ -bein y puede ser pensado como componentes de un campo vectorial covariante  $\mathbf{e}^a$ . Substituímos 2.2.231 en 2.2.230 y al compararlo con 2.2.229 vemos que

$$g_{\mu\nu}(x) = e^a_\mu(x)e^b_\nu(x)\eta_{ab} \quad (2.2.232)$$

El inverso (dual) del  $n$ -bein será denotado por  $e_a^\mu(x)$ , y cumple las siguientes expresiones

$$e_a^\mu(x)e^a_\nu(x) = \delta^\mu_\nu \quad (2.2.233)$$

$$e_a^\mu(x)e^b_\mu(x) = \delta^b_a \quad (2.2.234)$$

Luego, tenemos

$$dx^\mu = e_a^\mu(x)\omega^a(x) \quad (2.2.235)$$

$$\eta_{ab} = e_a^\mu(x)e_b^\nu(x)g_{\mu\nu}(x) \quad (2.2.236)$$

Podemos ver que de 2.2.232 o 2.2.236 el  $n$ -bein no está unívocamente determinado por el tensor métrico  $g_{\mu\nu}(x)$ . En cambio,  $e_a^\mu(x)$  y  $e'^a_\mu(x)$  satisfacen 2.2.232 si

$$e'^a_\mu(x) = L^a_b(x)e^b_\mu(x) \quad (2.2.237)$$

donde

$$L^a_c(x)L^b_d(x)\eta_{ab} = \eta_{cd} \quad (2.2.238)$$

$L^a_b(x)$  es una matriz que representa una transformación de Lorentz local. Ya que  $e_a^\mu(x)$  y  $e'^a_\mu(x)$  dados por 2.2.237 determinan la misma métrica del espacio-tiempo, la acción o las ecuaciones de campo deben ser independientes de si se elige  $e_a^\mu(x)$  o  $e'^a_\mu(x)$ . Esto significa que la acción para un campo es invariante bajo transformaciones de Lorentz locales.

Consideremos un campo vectorial  $A^\mu(x)$ . Expresaremos las componentes de este campo vectorial respecto al marco de referencia ortonormal utilizando el  $n$ -bein como

$$A^a(x) = e^a_\mu(x)A^\mu(x) \quad (2.2.239)$$

que bajo una transformación de Lorentz es

$$A^a(x) \rightarrow A'^a(x) = L^a_b(x)A^b(x) \quad (2.2.240)$$

No existe razón por la cual suponer que los vectores base del marco de referencia ortonormal local permanezcan inalterados bajo una transformación general de coordenadas  $x \rightarrow x'$ . Un cambio de coordenadas debe inducir una transformación de Lorentz local del espacio tangente, lo que significa que bajo una transformación general de coordenadas  $e^a_\mu(x)$  deberá transformar como un vector covariante salvo una transformación de Lorentz local, y  $A^a(x)$  deberá transformar como un conjunto de escalares también salvo una transformación de Lorentz local,

$$A^a(x) \rightarrow A'^a(x') = L^a_b(x)A^b(x) \quad (2.2.241)$$

La derivada covariante  $\nabla_\mu A'^a(x')$  debe ser definida de tal manera que bajo una transformación de Lorentz transforme como

$$\nabla'_\mu A'^a(x) = L^a_b(x)\nabla_\mu A^a(x) \quad (2.2.242)$$

y, bajo una transformación general de coordenadas, como

$$\nabla'_{\mu} A'^a(x') = \frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\mu}} L^a_b(x) \nabla_{\nu} A^b(x) \quad (2.2.243)$$

Ahora introducimos una conexión con componentes  $\omega_{\mu}^a_b(x)$  definida tal que

$$\nabla_{\mu} A^a = \partial_{\mu} A^a + \omega_{\mu}^a_b A^b \quad (2.2.244)$$

Las ecuaciones 2.2.242 y 2.2.243 se cumplen si  $\omega_{\mu}^a_b(x)$  bajo una transformación general de coordenadas transforma como

$$\omega'_{\mu}^a_b(x) = \frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\mu}} \{ L^a_b \omega_{\nu}^c_d (L^{-1})^d_b - (\partial_{\nu} L^a_c) (L^{-1})^c_b \} \quad (2.2.245)$$

donde, en el caso de una transformación de Lorentz local,  $\frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\mu}} = \delta^{\nu}_{\mu}$ .

Consideremos la derivada covariante del  $n$ -bein  $e^a_{\mu}$ . Ya que este transforma como 2.2.237 bajo una transformación de Lorentz local, y como un vector covariante bajo una transformación general de coordenadas, deberíamos definir

$$\nabla_{\mu} e^a_{\nu} = \partial_{\mu} e^a_{\nu} - \Gamma^{\lambda}_{\nu\mu} e^a_{\lambda} + \omega_{\mu}^a_b e^b_{\nu} \quad (2.2.246)$$

Otra manera de motivar esto es requerir que la derivada covariante obedezca la regla del producto (Liebniz), como es normal en el cálculo tensorial. Luego 2.2.239 da

$$\nabla_{\mu} A^a = (\nabla_{\mu} e^a_{\nu}) A^{\nu} + e^a_{\nu} (\nabla_{\mu} A^{\nu}) \quad (2.2.247)$$

Usando  $\nabla_{\mu} A^{\nu} = \partial_{\mu} A^{\nu} + \Gamma^{\nu}_{\mu\lambda} A^{\lambda}$  y 2.2.244, se obtiene 2.2.246.

La condición de que la conexión no contenga torsión hace que la derivada covariante del  $n$ -bein se anule. Esto puede verse fácilmente utilizando el enfoque de Cartan a la geometría diferencial. De  $\omega_{\mu}^a_b$ , definimos una uno-forma

$$\omega^a_b = \omega_{\mu}^a_b dx^{\mu} \quad (2.2.248)$$

Usando 2.2.231 tenemos

$$d\omega^a = e^a_{[\nu,\mu]} dx^{\nu} \wedge dx^{\mu} \quad (2.2.249)$$

donde  $d$  es la derivada exterior y  $\wedge$  es el producto exterior. Hemos utilizado la notación

$$e^a_{[\nu,\mu]} = \frac{1}{2} (\partial_{\nu} e^a_{\mu} - \partial_{\mu} e^a_{\nu}) \quad (2.2.250)$$

La condición para que la conexión esté libre de torsión es

$$0 = d\omega^a + \omega^a_b \wedge \omega^b \quad (2.2.251)$$

De 2.2.248 y 2.2.249 podemos inferir

$$\omega_{\mu b}^a = -e_b^\nu (\partial_\mu e_\nu^a - \Gamma_{\mu\nu}^\lambda e_\lambda^a) \quad (2.2.252)$$

La condición de que la conexión de Levi-Civita esté libre de torsión es equivalente a  $\Gamma_{\nu\mu}^\lambda = \Gamma_{\mu\nu}^\lambda$ . Si bajamos el índice  $a$  con la métrica de Minkowski en 2.2.252, de 2.2.234 tenemos

$$\omega_{\mu ba} = -\omega_{\mu ab} \quad (2.2.253)$$

Si ahora utilizamos 2.2.252 en 2.2.247, entonces sigue que

$$\nabla_\mu e_\nu^a = 0 \quad (2.2.254)$$

Esto muestra que la derivada covariante conmuta con la conversión de tensores desde y a un marco de referencia ortonormal local.

Por completitud, mostraremos el enfoque de Cartan para definir la dos-forma curvatura  $\mathcal{R}^a_b$  como

$$\mathcal{R}^a_b = d\omega^a_b + \omega^a_c \wedge \omega^c_b \quad (2.2.255)$$

Usando 2.2.248 es directo mostrar que

$$\mathcal{R}^a_b = \frac{1}{2} [\partial_\mu \omega_\nu^a_b - \partial_\nu \omega_\mu^a_b + \omega_\mu^a_c \omega_\nu^c_b - \omega_\nu^a_c \omega_\mu^c_b] dx^\mu \wedge dx^\nu \quad (2.2.256)$$

Las componentes de la curvatura dos-forma serán definidas por

$$\mathcal{R}^a_b = -\frac{1}{2} R_{\mu\nu}^a_b dx^\mu \wedge dx^\nu \quad (2.2.257)$$

donde podemos ver que

$$R_{\mu\nu}^a_b = \partial_\nu \omega_\mu^a_b - \partial_\mu \omega_\nu^a_b + \omega_\nu^a_c \omega_\mu^c_b - \omega_\mu^a_c \omega_\nu^c_b \quad (2.2.258)$$

y que  $R_{\mu\nu}^a_b = e^a_\lambda e_b^\sigma R^\lambda_{\sigma\mu\nu}$  donde  $R^\lambda_{\sigma\mu\nu}$  es el tensor de curvatura de Riemann.

Supongamos ahora que tenemos un campo  $\psi(x)$  que bajo una transformación de Lorentz local transforma como

$$\Psi(x) \rightarrow \Psi'(x) = S(L(x))\Psi(x) \quad (2.2.259)$$

donde  $S(L(x))$  es alguna representación del grupo de Lorentz. Asumiremos que  $\Psi(x)$  transforma como un escalar bajo una transformación general de coordenadas, lo cual para un tensor puede realizarse siempre usando el formalismo del  $n$ -bein para relacionar las componentes con un marco de referencia ortonormal local. Una transformación de Lorentz local infinitesimal es caracterizada por

$$L^a_b(x) = \delta^a_b + \delta\epsilon^a_b(x) \quad (2.2.260)$$

donde  $\delta\epsilon_{ab} = \eta_{ac}\delta\epsilon^c_b = -\delta\epsilon_{ba}$ . Escribimos

$$S(1 + \delta\epsilon) = 1 + i\delta\epsilon^{ab}\Sigma_{ab} \quad (2.2.261)$$

donde  $\Sigma_{ab} = -\Sigma_{ba}$  provee una representación matricial del álgebra de Lie para el grupo de Lorentz  $SO(1, n-1)$  que es independiente de  $x$ . Debido a que  $S(L)$  forma una representación del grupo de Lorentz, debemos tener

$$S(L)S(L')S(L^{-1}) = S(LL'L^{-1}) \quad (2.2.262)$$

para dos matrices de Lorentz arbitrarias  $L, L'$ . Haciendo que  $L'$  tenga una forma infinitesimal 2.2.260, usando 2.2.261, y trabajando hasta primer orden en  $\delta\epsilon^{ab}$  sigue

$$S(L)\Sigma_{ab}S(L^{-1}) = \frac{1}{2} [L^c_a(L^{-1})^d_b - L^c_b(L^{-1})^d_a] \Sigma_{cd} \quad (2.2.263)$$

Ahora nuevamente haciendo que  $L^a_b$  tenga una forma infinitesimal 2.2.260, usando 2.2.261, y trabajando hasta primer orden en  $\delta\epsilon^{ab}$  nos devuelve

$$[\Sigma_{ab}, \Sigma_{cd}] = \frac{i}{2} (\eta_{ac}\Sigma_{bd} + \eta_{ad}\Sigma_{bc} - \eta_{bc}\Sigma_{ad} - \eta_{bd}\Sigma_{ac}) \quad (2.2.264)$$

Esto define el álgebra de Lie para  $SO(1, n-1)$ .

Debido a que la transformación 2.2.259 es local, la derivada parcial de  $\Psi(x)$  no transformará covariantemente. Definimos entonces la derivada covariante de  $\Psi(x)$  como

$$\nabla_\mu\Psi(x) = \partial_\mu\Psi(x) + B_\mu(x)\Psi(x) \quad (2.2.265)$$

con el requisito de que bajo una transformación de Lorentz transforme como

$$\nabla'_{\mu}\Psi'(x) = S(L(x))\nabla_{\mu}\Psi(x) \quad (2.2.266)$$

Llamaremos a  $B_{\mu}(x)$  conexión de spin y deberá transformar como

$$B_{\mu}(x) \rightarrow B'_{\mu}(x) = S(L(x))B_{\mu}(x)S^{-1}(L(x)) - \partial_{\mu}S(L(x))S^{-1}(L(x)) \quad (2.2.267)$$

bajo una transformación de Lorentz local. Utilizando la forma infinitesimal [2.2.261](#) para  $S(L(x))$ , y trabajando hasta primer orden en  $\delta\epsilon^{ab}$  se obtiene

$$B'_{\mu}(x) = B_{\mu}(x) + i\delta\epsilon^{ab}[\Sigma_{ab}, B_{\mu}(x)] - i\partial_{\mu}\delta\epsilon^{ab}\Sigma_{ab} \quad (2.2.268)$$

La conexión debe adoptar su valor en el álgebra de Lie  $SO(1, n-1)$ , entonces podemos escribir

$$B_{\mu}(x) = B_{\mu}{}^{ab}(x)\Sigma_{ab} \quad (2.2.269)$$

Hasta primer orden en  $\delta\epsilon$ , [2.2.267](#) queda como

$$B'_{\mu}{}^{ab} = B_{\mu}{}^{ab} + B_{\mu}{}^b{}_c\delta\epsilon^{ca} - B_{\mu}{}^a{}_c\delta\epsilon^{cb} - i\partial_{\mu}\delta\epsilon^{ab} \quad (2.2.270)$$

Esta expresión debe ser comparada con la forma infinitesimal de [2.2.245](#) que es

$$\omega'_{\mu}{}^{ab} = \omega_{\mu}{}^{ab} + \omega_{\mu}{}^b{}_c\delta\epsilon^{ca} - \omega_{\mu}{}^a{}_c\delta\epsilon^{cb} - \partial_{\mu}\delta\epsilon^{ab} \quad (2.2.271)$$

La comparación entre [2.2.270](#) y [2.2.271](#) muestra que debemos tomar

$$B_{\mu}{}^{ab} = i\omega_{\mu}{}^{ab} \quad (2.2.272)$$

Entonces, la derivada covariante de  $\Psi$  es

$$\nabla_{\mu}\Psi = \partial_{\mu}\Psi + i\omega_{\mu}{}^{ab}\Sigma_{ab}\Psi \quad (2.2.273)$$

Una consecuencia importante que sigue de [2.2.258](#) y [2.2.264](#) es

$$[\nabla_{\mu}, \nabla_{\nu}]\Psi = -iR_{\mu\nu}{}^{ab}\Sigma_{ab}\Psi \quad (2.2.274)$$

Consideremos el caso cuando  $\Psi$  es un campo vectorial. Nuevamente expresamos las componentes del vector con respecto a un marco de referencia ortonormal local. Luego

$$\nabla_{\mu} \Psi^a = \partial_{\mu} \Psi^a + i\omega_{\mu}{}^{cd} (\Sigma_{cd})^a{}_b \Psi^b \quad (2.2.275)$$

donde  $(\Sigma_{cd})^a{}_b$  denota los elementos de la matriz  $\Sigma_{cd}$  para una representación vectorial del grupo de Lorentz. De 2.2.259 y 2.2.261, tenemos que bajo una transformación de Lorentz infinitesimal

$$\Psi'^a = [\delta^a{}_b + i\delta\epsilon^{cd} (\Sigma_{cd})^a{}_b] \Psi^b \quad (2.2.276)$$

Ya que  $\Psi^a$  es un vector, también tenemos

$$\Psi'^a = (\delta^a{}_b + \delta\epsilon^a{}_b) \Psi^b \quad (2.2.277)$$

Comparando 2.2.276 con 2.2.277 muestra que

$$(\Sigma_{cd})^a{}_b = -\frac{i}{2} (\delta_c^a \eta_{bd} - \delta_d^a \eta_{bc}) \quad (2.2.278)$$

Usando 2.2.278 en 2.2.275 nos conduce a

$$\nabla_{\mu} \Psi^a = \partial_{\mu} \Psi^a + i\omega_{\mu}{}^a{}_b \Psi^b \quad (2.2.279)$$

de acuerdo con el resultado 2.2.244. Este formalismo puede extenderse de manera simple para campos tensoriales arbitrarios.

Ahora consideraremos la ecuación de Dirac. En espacio plano es

$$[i\gamma^a \partial_a - m] \Psi(x) = 0 \quad (2.2.280)$$

donde las matrices  $\gamma^a$  satisfacen

$$\{\gamma^a, \gamma^b\} = 2 \eta_{ab} \quad (2.2.281)$$

La generalización de la ecuación de Dirac a espacio-tiempo curvo se obtiene reemplazando  $\partial_a \rightarrow e_a{}^{\mu} \nabla_{\mu}$ , donde  $\nabla_{\mu}$  es una derivada covariante apropiada para una representación espinorial del grupo de Lorentz. Luego, tenemos

$$[i\gamma^a e_a{}^{\mu} \nabla_{\mu} - m] \Psi(x) = 0 \quad (2.2.282)$$

Podemos escribir  $\gamma^\mu = e_a^\mu \gamma^a$  como matrices  $\gamma$  dependientes del espacio-tiempo, las cuales satisfacen

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2 g^{\mu\nu} \quad (2.2.283)$$

de tal manera que podemos escribir

$$[i\gamma^\mu \nabla_\mu - m] \Psi(x) = 0 \quad (2.2.284)$$

Lo único que falta es encontrar una forma explícita para la conexión de spin. Bajo una transformación de Lorentz local y una transformación general de coordenadas sigue que

$$\Psi'(x) = S(L(x))\Psi(x) \quad (2.2.285)$$

$$e'_b{}^\nu(x) = \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\mu} (L^{-1})^a{}_b e_a{}^\mu(x) \quad (2.2.286)$$

Utilizando estos resultados en [2.2.282](#) conduce a

$$[iS(L(x))\gamma^a S^{-1}(L(x))L^a{}_b(x)e'_b{}^\nu(x')\nabla'_\nu - m] \Psi'(x') = 0 \quad (2.2.287)$$

Para la covariancia de la ecuación de Dirac debemos requerir que

$$S(L(x))\gamma^a S^{-1}(L(x))L^a{}_b(x) = \gamma^b \quad (2.2.288)$$

Esto es lo mismo que requerir en espacio-tiempo plano que la ecuación de Dirac sea covariante bajo transformaciones de Lorentz, excepto que las transformaciones aquí son locales. Usando la forma infinitesimal dada en [2.2.260](#) y [2.2.261](#) llegamos a

$$0 = \delta\epsilon^a{}_b \gamma^b + i\delta\epsilon_{cd} [\Sigma^{cd}, \gamma^a] \quad (2.2.289)$$

Esto se cumple si

$$\Sigma^{cd} = -\frac{i}{8} [\gamma^c, \gamma^d] \quad (2.2.290)$$

Entonces derivada covariante de un espinor de Dirac en espacio-tiempo curvo es

$$\nabla_\mu \Psi = \partial_\mu \Psi + \frac{1}{8} \omega_\mu{}^{ab} [\gamma_a, \gamma_b] \Psi \quad (2.2.291)$$

y, finalmente, la ecuación de Dirac en espacio-tiempo curvo es

$$\left\{ i\gamma^\mu \left( \partial_\mu + \frac{1}{8} \omega_\mu{}^{ab} [\gamma_a, \gamma_b] \right) - m \right\} \Psi(x) = 0 \quad (2.2.292)$$

Como último resultado de esta sección se puede probar (aunque no lo haremos) que  $\nabla_\mu \gamma^a = 0$ .

#### 2.2.4.4. Gravedad por torsión y su acoplamiento con espinores

El marco geométrico para cualquier teoría de gravedad es el fibrado tangente. En cada punto del espacio base existe siempre un espacio tangente adjunto a él (la fibra del fibrado) en el cual el grupo de gauge actúa. Asumiremos que el espacio tangente será un espacio-tiempo de Minkowski. Las coordenadas del espacio base se denotarán con  $x^\mu$ , mientras que las coordenadas del espacio tangente se denotarán con  $x^a$ . Debido a que unas son funciones de las otras, las derivadas holonómicas en estos espacios son

$$\partial_\mu = (\partial_\mu x^a) \partial_a \quad \text{y} \quad \partial_a = (\partial_a x^\mu) \partial_\mu \quad (2.2.293)$$

donde  $\partial_\mu x^a$  es una tetrada trivial (holonómica) con inversa  $\partial_a x^\mu$ .

Desde un punto de vista geométrico, una conexión específica como un campo vectorial es transportado a lo largo de una curva. En una carta de coordenadas local con vectores base  $\{e_\mu\} = \{\partial_\mu\}$ , los coeficientes de la conexión  $\Gamma^\lambda_{\nu\mu}$  están definidos por

$$\nabla_{e_\nu} e_\mu = e_\lambda \Gamma^\lambda_{\nu\mu} \quad (2.2.294)$$

Además, podemos calcular la acción de  $\nabla$  sobre cualquier campo vectorial

$$\nabla_\mu V^\rho = \partial_\mu V^\rho + \Gamma^\rho_{\nu\mu} V^\nu \quad (2.2.295)$$

Dada una tetrada no trivial  $h^a_\mu$ , las métricas del espacio base y del espacio tangente están relacionadas por

$$g_{\mu\nu} = \eta_{ab} h^a_\mu h^b_\nu \quad (2.2.296)$$

Si  $e_\mu$  es una tetrada trivial, entonces la métrica  $g_{\mu\nu} = \eta_{ab} e^a_\mu e^b_\nu$  será simplemente la métrica de Minkowski en otro sistema de coordenadas. Una conexión satisface la condición de metricidad si

$$\nabla_\lambda g_{\mu\nu} \equiv \partial_\lambda g_{\mu\nu} - \Gamma^\rho_{\lambda\mu} g_{\rho\nu} - \Gamma^\rho_{\lambda\nu} g_{\rho\mu} \quad (2.2.297)$$

Por medio de la tetrada podemos relacionar a la conexión general  $\Gamma^\rho_{\nu\mu}$  con los coeficientes de rotación de Ricci o conexión de spin  $\omega_\mu^a_b$  utilizando el hecho de que la

derivada covariante de la misma se hace cero, es decir,

$$\nabla_{\mu} h^a_{\nu} = \partial_{\mu} h^a_{\nu} - \Gamma^{\rho}_{\nu\mu} h^a_{\rho} + \omega_{\mu}^a{}_b h^b_{\nu} \quad (2.2.298)$$

o, lo que es lo mismo,

$$\omega_{\mu}^a{}_b = h_b{}^{\nu} \Gamma^{\rho}_{\nu\mu} h^a_{\rho} - h_b{}^{\nu} \partial_{\mu} h^a_{\nu} \quad (2.2.299)$$

Los tensores de curvatura y torsión de la conexión  $\omega_{\mu}^a{}_b$  quedan definidos como

$$R^a{}_{b\nu\mu} = \partial_{\nu} \omega_{\mu}^a{}_b - \partial_{\mu} \omega_{\nu}^a{}_b + \omega_{\nu}^a{}_c \omega_{\mu}^c{}_b - \omega_{\mu}^a{}_c \omega_{\nu}^c{}_b \quad (2.2.300)$$

y

$$T^a{}_{\nu\mu} = \partial_{\nu} h^a_{\mu} - \partial_{\mu} h^a_{\nu} + \omega_{\nu}^a{}_c h^c_{\mu} - \omega_{\mu}^a{}_c h^c_{\nu} \quad (2.2.301)$$

Ambos tensores también pueden ser expresados en términos de la conexión general  $\Gamma^{\rho}_{\lambda\mu}$  como

$$R^{\rho}_{\lambda\nu\mu} \equiv h_a{}^{\rho} h^b{}_{\lambda} R^a{}_{b\nu\mu} = \partial_{\nu} \Gamma^{\rho}_{\lambda\mu} - \partial_{\mu} \Gamma^{\rho}_{\lambda\nu} + \Gamma^{\rho}_{\eta\nu} \Gamma^{\nu}_{\lambda\mu} - \Gamma^{\rho}_{\eta\mu} \Gamma^{\nu}_{\lambda\nu} \quad (2.2.302)$$

y

$$T^a{}_{\nu\mu} \equiv h_a{}^{\rho} T^a{}_{\nu\mu} = \Gamma^{\rho}_{\mu\nu} - \Gamma^{\rho}_{\nu\mu} \quad (2.2.303)$$

La conexión general puede descomponerse en una parte simétrica y otra antisimétrica

$$\Gamma^{\rho}_{\mu\nu} = \overset{\circ}{\Gamma}^{\rho}_{\mu\nu} + K^{\rho}_{\mu\nu} \quad (2.2.304)$$

donde

$$\overset{\circ}{\Gamma}^{\rho}_{\mu\nu} = \frac{1}{2} (\partial_{\mu} g_{\rho\nu} + \partial_{\nu} g_{\rho\mu} - \partial_{\rho} g_{\mu\nu}) \quad (2.2.305)$$

son los símbolos de Christoffel, y

$$K^{\rho}_{\mu\nu} = \frac{1}{2} (T_{\nu}{}^{\rho}{}_{\mu} + T_{\mu}{}^{\rho}{}_{\nu} + T^{\rho}{}_{\mu\nu}) \quad (2.2.306)$$

es el tensor de contorsión. También se puede expresar la ecuación 2.2.304 en términos de la conexión de spin

$$A_{\nu}{}^a{}_b = \overset{\circ}{A}_{\nu}{}^a{}_b + K_{\nu}{}^a{}_b \quad (2.2.307)$$

La gravedad teleparalela es caracterizada por la llamada conexión de spin de Weitzenböck que se anula, es decir,  $\overset{\circ}{A}_{\mu}{}^a{}_b$ . Utilizaremos una notación en la cual todas las magnitudes relacionadas con geometría Riemanniana se denotarán con un “o”, mientras que las magnitudes relacionadas con la geometría de Weitzenböck se denotarán con

un “•”. Entonces, la ecuación 2.2.307 queda como

$$0 = \overset{\circ}{A}_{\nu}{}^a{}_b + K_{\nu}{}^a{}_b \quad (2.2.308)$$

la correspondiente conexión de Weitzenböck es

$$\overset{\bullet}{\Gamma}{}^{\rho}{}_{\nu\mu} = h_a{}^{\rho} \partial_{\mu} h^a{}_{\nu} \quad (2.2.309)$$

la cual es una conexión que presenta torsión pero no curvatura. De esta forma, la derivada covariante de Weitzenböck se anula y otorga la condición de paralelismo absoluto

$$\overset{\bullet}{\nabla}_{\nu} h^a{}_{\mu} \equiv \partial_{\nu} h^a{}_{\mu} - \overset{\bullet}{\Gamma}{}^{\rho}{}_{\mu\nu} h^a{}_{\rho} = 0 \quad (2.2.310)$$

La torsión de la conexión de Weitzenböck es

$$\overset{\bullet}{T}{}^{\rho}{}_{\mu\nu} = \overset{\bullet}{\Gamma}{}^{\rho}{}_{\nu\mu} - \overset{\bullet}{\Gamma}{}^{\rho}{}_{\mu\nu} \quad (2.2.311)$$

Además, los símbolos de Christoffel y la conexión de Weitzenböck están relacionadas por

$$\overset{\bullet}{\Gamma}{}^{\rho}{}_{\mu\nu} = \overset{\circ}{\Gamma}{}^{\rho}{}_{\mu\nu} + \overset{\bullet}{K}{}^{\rho}{}_{\mu\nu} \quad (2.2.312)$$

donde

$$\overset{\bullet}{K}{}^{\rho}{}_{\mu\nu} = \frac{1}{2} (\overset{\bullet}{T}{}^{\rho}{}_{\mu\nu} + \overset{\bullet}{T}{}^{\rho}{}_{\nu\mu} - \overset{\bullet}{T}{}^{\rho}{}_{\mu\nu}) \quad (2.2.313)$$

es la contorsión de Weitzenböck. Como ya dijimos, la curvatura de la conexión de Weitzenböck se anula:

$$\overset{\bullet}{R}{}^{\rho}{}_{\theta\mu\nu} = \partial_{\mu} \overset{\bullet}{\Gamma}{}^{\rho}{}_{\theta\nu} - \partial_{\nu} \overset{\bullet}{\Gamma}{}^{\rho}{}_{\theta\mu} + \overset{\bullet}{\Gamma}{}^{\rho}{}_{\sigma\mu} \overset{\bullet}{\Gamma}{}^{\sigma}{}_{\theta\nu} - \overset{\bullet}{\Gamma}{}^{\rho}{}_{\sigma\nu} \overset{\bullet}{\Gamma}{}^{\sigma}{}_{\theta\mu} \quad (2.2.314)$$

Ahora si sustituímos  $\overset{\bullet}{\Gamma}{}^{\rho}{}_{\mu\nu}$  dado por la expresión 2.2.309, obtenemos

$$\overset{\bullet}{R}{}^{\rho}{}_{\theta\mu\nu} = \overset{\circ}{R}{}^{\rho}{}_{\theta\mu\nu} + \overset{\bullet}{Q}{}^{\rho}{}_{\theta\mu\nu} \equiv 0 \quad (2.2.315)$$

donde  $\overset{\circ}{R}{}^{\rho}{}_{\theta\mu\nu}$  es la curvatura con los símbolos de Christoffel, y

$$\overset{\bullet}{Q}{}^{\rho}{}_{\theta\mu\nu} = \overset{\bullet}{D}{}_{\mu} \overset{\bullet}{K}{}^{\rho}{}_{\theta\nu} - \overset{\bullet}{D}{}_{\mu} \overset{\bullet}{K}{}^{\rho}{}_{\theta\mu} + \overset{\bullet}{K}{}^{\sigma}{}_{\theta\nu} \overset{\bullet}{K}{}^{\rho}{}_{\sigma\mu} - \overset{\bullet}{K}{}^{\sigma}{}_{\theta\mu} \overset{\bullet}{K}{}^{\rho}{}_{\sigma\nu} \quad (2.2.316)$$

es un tensor escrito en términos de la conexión de Weitzenböck solamente. En esta expresión  $\overset{\bullet}{D}{}_{\mu}$  es la derivada covariante teleparalela, la cual actuando sobre un vector

del espacio-tiempo da

$$\dot{\mathcal{D}}_\rho V^\mu \equiv \partial_\rho V^\mu + \left( \dot{\Gamma}^\mu_{\lambda\rho} - \dot{K}^\mu_{\lambda\rho} \right) V^\lambda \quad (2.2.317)$$

Lo cual no es más que la derivada covariante de la geometría Riemanniana escrita en términos de la conexión de Weitzenböck.

La ecuación 2.2.315 tiene dos componentes:  $\overset{\circ}{R}{}^\rho_{\theta\mu\nu}$  que proviene de los símbolos de Christoffel y compensa exactamente la contribución de  $\overset{\circ}{Q}{}^\rho_{\theta\mu\nu}$  proveniente de la conexión de Weitzenböck, brindando una curvatura neta igual a cero. Esta condición brinda la equivalencia entre la descripción Riemanniana de la gravedad y la descripción tele-paralela de la gravedad.

La interacción entre la materia y la gravedad puede ser descrita aplicando el principio de acoplamiento mínimo, en el cual uno reemplaza las derivadas parciales por derivadas covariantes. En este enfoque los potenciales o conexiones de gauge juegan un papel importante. La conexión de spin (geometría Riemanniana) asumiendo valores en el álgebra de Lie del grupo de Lorentz vale

$$\overset{\circ}{A}_\mu = \frac{1}{2} \overset{\circ}{A}_\mu{}^{ab} S_{ab} \quad (2.2.318)$$

El principio de acoplamiento mínimo nos brinda la derivada covariante de Fock-Ivanenko:

$$\overset{\circ}{\mathcal{D}}_\mu = \partial_\mu - \frac{i}{2} \overset{\circ}{A}_\mu{}^{ab} S_{ab} \quad (2.2.319)$$

El campo de la tetra-da puede ser utilizado para transformar tensores de Lorentz a tensores del espacio base y viceversa, lo cual hace que la derivada de Fock-Ivanenko se reduzca a la derivada covariante usual

$$\overset{\circ}{\mathcal{D}}_\mu V^a = h^a{}_\rho \overset{\circ}{\nabla}_\mu V^\rho \quad (2.2.320)$$

Sin embargo, el caso de campos espinoriales de spin semi-entero no existe representación en el espacio base. Por lo tanto, la única derivada covariante posible para un espinor de Dirac  $\psi$  es

$$\overset{\circ}{\mathcal{D}}_\mu \psi = \partial_\mu \psi - \frac{i}{2} \overset{\circ}{A}_\mu{}^{ab} S_{ab} \psi \quad (2.2.321)$$

Al querer obtener una expresión similar para el caso de teleparalelismo necesitamos encontrar una conexión de spin teleparalela correcta. Podemos escribir

$$\dot{A}_{\mu}^a{}_b = h^a{}_{\rho} \dot{\Gamma}^{\rho}{}_{\nu\mu} h_b{}^{\mu} + h^a{}_{\rho} \partial_{\mu} h_b{}^{\mu} \equiv h^a{}_{\rho} \dot{\nabla}_{\mu} h_b{}^{\mu} \quad (2.2.322)$$

Pero debido a la condición de teleparalelismo absoluto, vemos que  $\dot{A}_{\mu}^a{}_b = 0$ . Esto no significa en gravedad teleparalela la conexión de spin que define el principio de acoplamiento mínimo sea cero. De hecho, debido al carácter afín de la conexión, existen infinitas posibilidades.

Adoptaremos una conexión cuyo acoplamiento resulte equivalente al acoplamiento de la gravedad en geometría Riemanniana. Uno puede obtener

$$\overset{\circ}{A}_{\mu}^a{}_b = -\dot{K}_{\mu}^a{}_b + 0 \quad (2.2.323)$$

donde

$$\dot{K}_{\mu}^a{}_b = h^a{}_{\rho} \dot{K}^{\rho}{}_{\nu\mu} h_b{}^{\nu} \quad (2.2.324)$$

La conexión “cero”<sup>es</sup> necesaria para hacer que el lado derecho de la ecuación sea una verdadera conexión. Basado en esto, podemos decir que la conexión de spin teleparalela es

$$\dot{\Omega}_{\mu}^a{}_b = -\dot{K}_{\mu}^a{}_b + 0 \quad (2.2.325)$$

con ello, la derivada de Fock-Ivanenko queda

$$\dot{\mathcal{D}}_{\mu} = \partial_{\mu} - \frac{i}{2} \dot{\Omega}_{\mu}^a{}_b S_a{}^b \quad (2.2.326)$$

Y, utilizando la expresión [2.2.325](#), tenemos

$$\dot{\mathcal{D}}_{\mu} = \partial_{\mu} + \frac{i}{2} \dot{K}_{\mu}^a{}_b S_{ab} \quad (2.2.327)$$

donde eliminamos la conexión cero por simplicidad. Tal derivada covariante es invariante bajo transformaciones de Lorentz locales, es autoconsistente y es equivalente a la derivada covariante obtenida en geometría Riemanniana. En el contexto de geometría Riemanniana, la derivada covariante de la tetraeda se anula

$$\partial_{\nu} h_b{}^{\rho} + \overset{\circ}{\Gamma}^{\rho}{}_{\mu\nu} h_b{}^{\mu} - \overset{\circ}{A}_{\nu}^a{}_b h_a{}^{\rho} = 0 \quad (2.2.328)$$

mientras que la versión teleparalela puede obtenerse reemplazando  $\overset{\circ}{\Gamma}{}^\rho{}_{\mu\nu}$  y  $\overset{\circ}{A}{}^\nu{}_b$  por sus contrapartes teleparalelas, entonces

$$\partial_\nu h_b{}^\rho + \left( \overset{\circ}{\Gamma}{}^\rho{}_{\mu\nu} - \overset{\circ}{K}{}^\rho{}_{\mu\nu} \right) h_b{}^\mu + \overset{\circ}{K}{}^\nu{}_b h_a{}^\rho = 0 \quad (2.2.329)$$

donde podemos ver que se cancela el tensor de contorsión, devolviendo la condición de paralelismo absoluto

$$\partial_\nu h_b{}^\rho + \overset{\circ}{\Gamma}{}^\rho{}_{\mu\nu} h_b{}^\mu = 0 \quad (2.2.330)$$

que es la ecuación fundamental de la gravedad teleparalela. Esto muestra la consistencia de identificar a la conexión de spin como menos el tensor de contorsión más una conexión cero. Realizando esto, se puede mostrar que la gravedad teleparalela es equivalente con la gravedad en geometría Riemanniana incluso en la presencia de campos espinoriales.

En espacio-tiempo de Minkowski, el Lagrangiano del campo espinorial es

$$\mathcal{L}_\psi = \frac{ic\hbar}{2} (\bar{\psi}\gamma^a\psi - \partial_a\bar{\psi}\gamma^a\psi) - mc^2\bar{\psi}\psi \quad (2.2.331)$$

con la correspondiente ecuación de Dirac

$$i\hbar\gamma^a\partial_a\psi - mc\psi = 0 \quad (2.2.332)$$

El Lagrangiano de Dirac acoplado con la gravedad teleparalela es

$$\mathcal{L}_\psi = h \left[ \frac{ic\hbar}{2} \left( \bar{\psi}\gamma^\mu \overset{\circ}{D}_\mu\psi - \overset{\circ}{D}_\mu^*\bar{\psi}\gamma^\mu\psi \right) - mc^2\bar{\psi}\psi \right] \quad (2.2.333)$$

donde  $\gamma^\mu \equiv \gamma^\mu(x) = \gamma^a h_a{}^\mu$ . Usando la identidad  $\overset{\circ}{D}_\mu(h\gamma^\mu) = 0$ , la versión teleparalela de la ecuación de Dirac es

$$i\hbar\gamma^\mu \overset{\circ}{D}_\mu\psi - mc\psi = 0 \quad (2.2.334)$$

Comparando las derivadas covariantes de Fock-Ivanenko 2.2.321 y 2.2.327 vemos que en el caso de la gravedad en geometría Riemanniana el espinor de Dirac se acopla con los coeficientes de rotación de Ricci  $\overset{\circ}{A}{}^\mu{}_\nu$ , mientras que en la gravedad teleparalela se acopla con el tensor de contorsión  $\overset{\circ}{K}{}^\mu{}_\nu$ .

### 2.2.5. Condición de frontera de billar para partículas sin masa de espín semi-entero

El Hamiltoniano de Dirac que describe partículas sin masa de espín semi-entero bajo la acción de un potencial  $V(\mathbf{r})$  es

$$H = -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla + V(\mathbf{r})\sigma_z \quad (2.2.335)$$

donde  $\sigma$  son las matrices de Pauli,  $H$  actúa sobre la función de onda de un espinor de dos componentes  $\psi(\mathbf{r}) = (\psi_1, \psi_2)$ . Si  $V(\mathbf{r})$  describe una pared dura delimitando un dominio finito  $D$  (billares), entonces esto impone una condición de frontera para  $\psi_2/\psi_1$ . Los autoestados de energía pueden obtenerse de la ecuación de Dirac

$$(-i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + V(\mathbf{r})\sigma_z) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.2.336)$$

Dentro del dominio del billar  $D$ ,  $V(\mathbf{r}) = 0$  y podemos escribir 2.2.336 como

$$-i \begin{pmatrix} 0 & \partial_x - i\partial_y \\ \partial_x + i\partial_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = k \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (2.2.337)$$

donde introducimos el número de onda  $k$ , definido por

$$E = \hbar ck \quad (2.2.338)$$

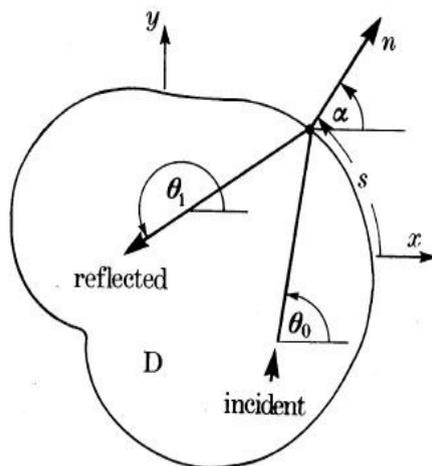
La solución de energía positiva cuyo vector de onda  $\mathbf{k}$  tiene longitud  $k$  y forma un ángulo  $\theta$  con el eje  $x$  es

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \exp\{-\frac{1}{2}i\theta\} \\ \exp\{\frac{1}{2}i\theta\} \end{pmatrix} \exp\{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\} \quad (2.2.339)$$

Consideremos ahora que la frontera del dominio  $D$  es parametrizada por la longitud de arcos  $s$  y permitamos que el vector normal a  $s$  apuntando hacia afuera sea

$$\mathbf{n}(s) = (\cos \alpha(s), \sin \alpha(s)) \quad (2.2.340)$$

La condición de frontera debe ser tal que  $\psi(\mathbf{r})$  y 2.2.336 definan  $H$  como un operador hermítico dentro de  $D$ . De esta forma, los valores esperados de  $E$  en cualquier estado


 FIGURA 2.7: Funciones de onda planas incidentes y reflejadas en un dominio  $D$ .

$\psi$  deben ser reales. El teorema de Gauss nos da

$$\begin{aligned}
 E &= -i\hbar c \iint_D dx dy \psi^* \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi \\
 &= -i\hbar c \iint_D \nabla \cdot (\psi^* \boldsymbol{\sigma} \psi) + i\hbar c \iint_D dx dy \nabla \psi^* \cdot \boldsymbol{\sigma} \psi = -i\hbar \oint ds \mathbf{n}(s) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}(s)) + E^*
 \end{aligned} \tag{2.2.341}$$

donde  $\mathbf{u}(\mathbf{r}(s)) = c(\psi_1^*, \psi_2^*) \boldsymbol{\sigma} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = 2c [\text{Re}(\psi_1^*(\mathbf{r})\psi_2(\mathbf{r})), \text{Im}(\psi_1^*(\mathbf{r})\psi_2(\mathbf{r}))]$ , y entonces la condición de hermiticidad es

$$\text{Im } E = -\frac{1}{2}\hbar \oint ds \mathbf{n}(s) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}(s)) = 0 \tag{2.2.342}$$

De esto sigue que una condición de frontera local debe asegurar que no exista una corriente saliente para cualquier punto de  $s$ . Realizando el producto  $\mathbf{n}(s) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}(s)) = 0$  tenemos

$$\cos \alpha \text{Re}(\psi_1^*(\mathbf{r})\psi_2(\mathbf{r})) + \sin \alpha \text{Im}(\psi_1^*(\mathbf{r})\psi_2(\mathbf{r})) = 0 \tag{2.2.343}$$

lo cual es equivalente a

$$\frac{\psi_2}{\psi_1} = iB \exp\{i\alpha(s)\} \tag{2.2.344}$$

donde  $B$  es real y posiblemente dependiente de  $s$ . La libertad en la elección de  $B$  implica que no se pueda adoptar una condición de frontera única, aunque se deberá respetar que  $B\psi + \mathbf{n} \cdot \nabla \psi = 0$  para todo  $s$ . El valor de  $B$  será determinado por la naturaleza física de la pared, es decir, por el comportamiento de  $V(\mathbf{r})$  en ese lugar.

Consideraremos aquí el caso

$$V \rightarrow +\infty \quad \text{outside } D \quad (2.2.345)$$

para el cual demostraremos que

$$B = 1 \quad (2.2.346)$$

Primero debemos encontrar el coeficiente de reflexión  $R$  de la función de onda plana para la incidencia en una frontera recta. Nos fijamos en la figura ?? y en la ecuación 2.2.339 y vemos que la onda dentro de  $D$  (incidente más reflejada) es

$$\frac{\psi}{\sqrt{2}} \left[ \begin{pmatrix} \exp \left\{ -\frac{1}{2}i\theta_0 \right\} \\ \exp \left\{ \frac{1}{2}i\theta_0 \right\} \end{pmatrix} \exp \{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}\} + R \begin{pmatrix} \exp \left\{ -\frac{1}{2}i\theta_1 \right\} \\ \exp \left\{ \frac{1}{2}i\theta_1 \right\} \end{pmatrix} \exp \{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}\} \right] \quad (2.2.347)$$

Ambas direcciones están relacionadas por especularidad

$$\theta_1 = \pi + 2\alpha - \theta_0 \quad (2.2.348)$$

Las componentes de la onda 2.2.347 dentro de  $D$  deben ser continuas con la onda evanescente fuera de  $D$ . Para encontrar esto, resolvemos la ecuación 2.2.336 para un potencial constante  $V > E$ . Utilizaremos las coordenadas  $n, s$  normal y tangencial a la frontera, junto con la relación

$$\partial_x \pm i\partial_y = \exp \{ \pm i\alpha \} (\partial_n \pm i\partial_s) \quad (2.2.349)$$

La solución a 2.2.336 que oscila con el número de onda  $K$  a lo largo de la frontera es

$$\psi = T \begin{pmatrix} -i[(V + E)(q - K)]^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2}i\alpha \right\} \\ [(V - E)(q + K)]^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{1}{2}i\alpha \right\} \end{pmatrix} \exp \{iKs - qn\} / [2(Vq - EK)]^{\frac{1}{2}} \quad (2.2.350)$$

donde  $T$  es el coeficiente de transmisión y  $q$  está dado por

$$E^2 = \hbar^2 c^2 (K^2 - q^2) + V^2 \quad (2.2.351)$$

Para lograr coincidencia en la frontera,  $K$  debe ser elegido igual a las componentes tangenciales  $\mathbf{k}_0$  y  $\mathbf{k}_1$ . Ahora dejemos que  $V \rightarrow +\infty$ , haciendo así que  $q \rightarrow \infty$  y a la pared impenetrable. La ecuación 2.2.350 se simplifica considerablemente, y haciéndola

coincidir con 2.2.347 en la pared da

$$\begin{cases} \exp\{-\frac{1}{2}i\theta_0\} + R \exp\{-\frac{1}{2}i\theta_1\} = -iT \exp\{-\frac{1}{2}i\alpha\}, \\ \exp\{\frac{1}{2}i\theta_0\} + R \exp\{\frac{1}{2}i\theta_1\} = T \exp\{\frac{1}{2}i\alpha\} \end{cases} \quad (2.2.352)$$

Eliminando  $T$  y usando 2.2.348 obtenemos

$$R = 1 \quad (2.2.353)$$

Ahora  $B$  en 2.2.344 es obtenido del ratio de las componentes de  $\psi$  en la pared, y como resultado se tiene que  $B = 1$ . Este argumento es válido para estados con  $E < 0$ , aunque depende en que  $V$  sea positivo; si  $V \rightarrow -\infty$ , la condición de frontera 2.2.344 tiene  $B = -1$ .

### 2.2.5.1. Distribución de autovalores para billares con contorno circular

Es natural escribir la ecuación de Dirac en coordenadas polares  $\mathbf{r} = (r, \varphi)$

$$-i \begin{pmatrix} 0 & \exp\{-i\varphi\} (\partial_r - i\partial_\varphi/r) \\ \exp\{i\varphi\} (\partial_r + i\partial_\varphi/r) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = k \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (2.2.354)$$

la cual tiene soluciones regulares del estilo

$$\psi_l = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \exp\{il\varphi\} \begin{pmatrix} J_l(kr) \\ i \exp\{i\varphi\} J_{l+1}(kr) \end{pmatrix} \quad (2.2.355)$$

las cuales son autofunciones de la componente  $z$  del momento angular total:

$$L\psi_l = \left(-i\partial_\varphi + \frac{1}{2}\sigma_z\right) \psi_l = \left(l + \frac{1}{2}\right) \psi_l \quad (2.2.356)$$

Las ondas parciales  $\psi_l$  forman un conjunto completo en el que se pueden expandir las autofunciones de energía de cualquier dominio. Para un círculo, a las funciones  $\psi_l$  se las pueden hacer cumplir la condición de frontera 2.2.344 individualmente. Tomando la frontera como  $r = 1$  y notando que  $\alpha = \varphi$ , obtenemos (cuando  $B = 1$ ) la ecuación determina los autovalores  $k_{nl}$  de 2.2.355 como

$$J_l(k_{nl}) = J_{l+1}(k_{nl}) \quad (2.2.357)$$

# Capítulo 3

## Metodología

El presente trabajo es esencialmente teórico y por tanto se realizó una investigación de índole exploratoria. La metodología se puede resumir en el siguiente itemizado:

- I. Se empleó la teoría de defectos en sólidos y su enfoque geométrico respetando un gauge elástico.
- II. Se utilizó la métrica obtenida por Katanaev para dislocaciones de cuña en el enfoque geométrico.
- III. Se aplicó el método de enlaces fuertes para determinar la velocidad de Fermi en el grafeno y utilizarla en la ecuación de Dirac.
- IV. Se calculó el espectro de baja energía en el grafeno utilizando la ecuación de Dirac en espacio-tiempo curvo.

# Capítulo 4

## Resultados y Discusión

### 4.1. Presentación de resultados

Como se ha mencionado en la sección [2.2.1.8](#), el proceso para la creación de una dislocación en cuña coincide con la definición de una singularidad cónica con la excepción de que en este último caso no entra en juego el módulo de Poisson correspondiente a la teoría de la elasticidad.

#### 4.1.1. Establecimiento de la ecuación de Dirac

El tensor de curvatura se anula en todos los puntos excepto en el origen, lo cual sugiere la utilización de la geometría de Weitzenböck para describir a los defectos cónicos. Nuestro objetivo es hallar la ecuación de Dirac en el grafeno con la presencia de una dislocación de cuña en el origen. Para esto, debemos calcular la derivada covariante de Fock-Ivanenko [2.2.327](#) desarrollada en la sección [2.2.4.4](#) mediante la incorporación del tensor de contorsión.

Comenzamos introduciendo la métrica para una dislocación de cuña correspondiente a la ecuación [2.2.81](#) obtenida en la sección [2.2.1.8](#)

$$ds^2 = \left(\frac{r}{R}\right)^{2\gamma_1-2} \left(dr^2 + \frac{\alpha^2(\rho)r^2}{\gamma_1^2}d\varphi^2\right), \quad (4.1.1)$$

con  $0 < r \leq R$ ,  $0 \leq \varphi < 2\pi$ ,  $\alpha = 1 + \theta$  y

$$\gamma_1 = \gamma = \frac{-\theta\sigma + \sqrt{\theta^2\sigma^2 + 4(1+\theta)(1-\sigma)}}{2(1-\sigma)} \quad (4.1.2)$$

donde renombramos por simplicidad a  $\gamma_1$  por  $\gamma$ . Realizamos una transformación de coordenadas en la componente radial

$$\rho = \frac{r^\gamma}{\gamma R^{\gamma-1}} \quad (4.1.3)$$

obteniendo la métrica explícita de una singularidad cónica

$$ds^2 = d\rho^2 + \alpha^2(\rho)\rho^2 d\varphi^2, \quad (4.1.4)$$

con  $0 < \rho \leq \frac{R}{\gamma}$ ,  $0 \leq \varphi < 2\pi$ . Esta métrica puede ser utilizada para describir una hoja de grafeno con la presencia de una dislocación de cuña en el origen agregando la componente temporal y utilizando una signatura (+ - -)

$$ds^2 = dt^2 - d\rho^2 - \alpha^2(\rho)\rho^2 d\varphi^2, \quad (4.1.5)$$

o, expresada en forma matricial,

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -\alpha^2(\rho)\rho^2 \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{\alpha^2(\rho)\rho^2} \end{pmatrix} \quad (4.1.6)$$

donde la dislocación de cuña puede ser modelada con una función escalón

$$\alpha(\rho) = \begin{cases} \alpha = 1 + \theta & , \quad \text{si } \rho > a \\ 1 & , \quad \text{si } \rho \leq a \end{cases} \quad (4.1.7)$$

y obtener el defecto haciendo que  $a \rightarrow 0$ . Adoptamos el vielbein como

$$e^i{}_\mu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\varphi) & -\alpha(\rho)\rho \sin(\varphi) \\ 0 & \sin(\varphi) & \alpha(\rho)\rho \cos(\varphi) \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad e_i{}^\mu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\varphi) & \sin(\varphi) \\ 0 & -\frac{\sin(\varphi)}{\alpha(\rho)\rho} & \frac{\cos(\varphi)}{\alpha(\rho)\rho} \end{pmatrix} \quad (4.1.8)$$

Ahora nos centraremos en obtener la ecuación de Dirac por fuera del defecto, es decir,

$\rho > a$ . Para calcular las componentes del tensor de torsión utilizamos la definición de la conexión de Weitzenböck 2.2.309 junto con la ecuación 2.2.311. Las componentes no nulas del tensor de torsión son

$$\dot{T}^{\varphi}_{\rho\varphi} = -\dot{T}^{\varphi}_{\varphi\rho} = \frac{\alpha - 1}{\alpha\rho} \quad (4.1.9)$$

lo cual muestra que en ausencia de defecto ( $\alpha = 1$ ) la torsión se anula en todos lados, mientras que en presencia de defecto ( $\alpha \neq 1$ ) existe una torsión no nula a lo largo de todo el medio.

Sin embargo, la derivada covariante de Fock-Ivanenko depende del tensor de contorsión. Para calcular las componentes de dicho tensor utilizamos la ecuación 2.2.312 teniendo en cuenta que los símbolos de Christoffel no nulos son

$$\overset{\circ}{\Gamma}^{\rho}_{\varphi\varphi} = -\alpha^2\rho, \quad \overset{\circ}{\Gamma}^{\varphi}_{\rho\varphi} = \frac{1}{\rho} \quad (4.1.10)$$

Se puede mostrar que existe una única componente no nula del tensor de contorsión

$$\dot{K}^{\rho}_{\varphi\varphi} = \alpha\rho(\alpha - 1) \quad (4.1.11)$$

la cual puede ser utilizada en la ecuación de Dirac adecuando sus índices tensoriales como

$$\dot{K}_{\varphi}^{12} = (1 - \alpha) \quad (4.1.12)$$

A partir de este resultado, contamos con los elementos necesarios para establecer la ecuación de Dirac definitivamente. Para poder resolver la ecuación de Dirac, las matrices  $\gamma^{\mu}$  deben respetar el álgebra de Clifford

$$\{\gamma^{\mu}, \gamma^{\nu}\} = 2g^{\mu\nu}\mathbb{1} \quad (4.1.13)$$

que en  $(2 + 1)d$  pueden adoptarse como función de las matrices de Pauli  $\gamma^0 = \sigma^3$ ,  $\gamma^1 = i\sigma^2$  y  $\gamma^2 = -i\sigma^1$ . Comenzamos con la forma general de la ecuación de Dirac 2.2.334

$$i\hbar c\gamma^{\mu} \left( \partial_{\mu} + \frac{i}{2} \dot{K}_{\mu}^{ab} S_{ab} \right) \psi - mc^2\psi = 0 \quad (4.1.14)$$

a la cual escribiremos en la forma de Schrödinger separando la componente temporal de las componentes espaciales. Con el fin garantizar su hermiticidad, pre-multiplicamos

la ecuación de Dirac por  $\gamma^t$

$$\left\{ i\hbar c \gamma^t \gamma^t \left( \partial_t + \frac{i}{2} \dot{K}_t^{ab} S_{ab} \right) + i\hbar c \gamma^t \gamma^\nu \left( \partial_\nu + \frac{i}{2} \dot{K}_\nu^{ab} S_{ab} \right) - mc^2 \right\} \psi = 0 \quad (4.1.15)$$

donde  $\nu$  puede tomar valores  $\rho$  o  $\varphi$  y, utilizando la identidad  $\gamma^t \gamma^t = g^{tt} \mathbb{1}$

$$i\hbar c \mathbb{1} \partial_t \psi = \frac{1}{g^{tt}} \left( \gamma^t mc^2 - i\hbar c \gamma^t \gamma^c e_c^\nu \partial_\nu + \frac{1}{2} \hbar c \gamma^t \gamma^c e_c^\nu \dot{K}_\nu^{ab} S_{ab} \right) \psi + \frac{1}{2} \hbar c \mathbb{1} \dot{K}_t^{ab} S_{ab} \psi \quad (4.1.16)$$

Recordando que  $g^{tt} = 1$  y  $\dot{K}_t^{ab} = \dot{K}^{ab}_\rho = 0$  obtenemos

$$i\hbar c \mathbb{1} \partial_t \psi = \left( \gamma^t mc^2 - i\hbar c \gamma^t \gamma^c e_c^\nu \partial_\nu + \frac{1}{2} \hbar c \gamma^t \gamma^c e_c^\nu \dot{K}_\nu^{ab} S_{ab} \right) \psi \quad (4.1.17)$$

Ahora expandimos los índices utilizando el convenio de suma de Einstein como

$$i\hbar c \mathbb{1} \partial_t \psi = \left( \gamma^t mc^2 - i\hbar c \gamma^t \Gamma(\varphi) \partial_\rho - i\hbar c \gamma^t \Gamma'(\varphi) \frac{\partial_\varphi}{\alpha\rho} + \frac{1}{2\alpha\rho} \hbar c \gamma^t \Gamma'(\varphi) \dot{K}^{ab}_\nu S_{ab} \right) \psi \quad (4.1.18)$$

donde  $\Gamma(\varphi) = \gamma^1 \cos(\varphi) + \gamma^2 \sin(\varphi)$ ,  $\Gamma'(\varphi) = -\gamma^1 \sin(\varphi) + \gamma^2 \cos(\varphi)$ . Utilizando la expresión  $S_{ab} = \frac{i}{4} [\gamma_a, \gamma_b]$  y teniendo en cuenta que  $\dot{K}^{12}_\varphi = -\dot{K}^{21}_\varphi$ ,  $[\gamma_1, \gamma_2] = -[\gamma_2, \gamma_1]$  y  $[\gamma_1, \gamma_2] = -2i\sigma^3$  podemos escribir

$$i\hbar c \mathbb{1} \partial_t \psi = \left( \gamma^t mc^2 - i\hbar c \gamma^t \Gamma(\varphi) \partial_\rho - i\hbar c \gamma^t \Gamma'(\varphi) \frac{\partial_\varphi}{\alpha\rho} + \frac{1}{2\alpha\rho} \hbar c \gamma^t \Gamma'(\varphi) \dot{K}^{12}_\varphi \sigma^3 \right) \psi \quad (4.1.19)$$

Además,  $\dot{K}^{12}_\varphi = 1 - \alpha$ ,

$$i\hbar c \mathbb{1} \partial_t \psi = \left( \gamma^t mc^2 - i\hbar c \gamma^t \Gamma(\varphi) \partial_\rho - i\hbar c \gamma^t \Gamma'(\varphi) \frac{\partial_\varphi}{\alpha\rho} + \hbar c \frac{1 - \alpha}{2\alpha\rho} \gamma^t \Gamma'(\varphi) \sigma^3 \right) \psi \quad (4.1.20)$$

donde encontramos explícitamente que el Hamiltoniano de Dirac es

$$H = \gamma^t mc^2 - i\hbar c \gamma^t \Gamma(\varphi) \partial_\rho - i\hbar c \gamma^t \Gamma'(\varphi) \frac{\partial_\varphi}{\alpha\rho} + \hbar c \frac{1 - \alpha}{2\alpha\rho} \gamma^t \Gamma'(\varphi) \sigma^3 \quad (4.1.21)$$

### 4.1.2. Resolución de la ecuación de Dirac

Consideramos ahora una geometría cónica bidimensional que describe una dislocación de cuña en el grafeno. Utilizando el transporte paralelo se puede probar que la función de onda electrónica adquiere una fase geométrica dada por la métrica 4.1.5. Al estudiar las propiedades geométricas de los nano-conos del grafeno necesitamos

la ayuda del vielbein para transportar paralelamente a un espinor a lo largo de un contorno cerrado, lo cual nos devuelve la matriz de holonomía. Cuando un vector es transportado paralelamente a lo largo de un circuito cerrado en una variedad  $M$ , la curvatura de dicha variedad hace que un vector en un punto  $p$  inicialmente, aparezca rotado respecto a su orientación inicial en el espacio tangente cuando este retorna a  $p$ . La holonomía es la transformación lineal dependiente de la trayectoria responsable de esta rotación y se define como

$$U(C) = \exp \left( - \oint_C \Gamma_\mu(x) dx^\mu \right) \quad (4.1.22)$$

donde  $\Gamma_\mu$  es la conexión espinorial dada por  $\frac{i}{2} \dot{K}_\mu^{ab} S_{ab}$ . La matriz de holonomía obtenida del transporte paralelo de un espinor a lo largo de una trayectoria  $C$  alrededor del cono, está dada por

$$U(C) = \exp \left( - \oint_C \Gamma_\varphi d\varphi \right) = \exp \left( - \int_0^{2\pi} \frac{i}{2} (1 - \alpha) \sigma^3 \varphi \right) = \exp \left( -i\pi(1 - \alpha) \sigma^3 \right) \quad (4.1.23)$$

Esta expresión nos brinda la fase cuántica adquirida por la función de onda cuando se transporta alrededor del nano-cono. Es decir,

$$\psi = U(C) \psi_0 \quad (4.1.24)$$

Utilizando esto en la ecuación 4.1.20 remueve el término con la conexión espinorial en la ecuación de Dirac, es decir,

$$i\hbar c \mathbb{1} \partial_t \psi_0 = \left( \gamma^t m c^2 - i\hbar c \gamma^t \Gamma(\varphi) \partial_\rho - i\hbar c \gamma^t \Gamma'(\varphi) \frac{\partial \varphi}{\alpha \rho} \right) \psi_0 \quad (4.1.25)$$

Nos damos cuenta que la ecuación de Dirac depende de  $\varphi$ , por lo que necesitamos un operador que conmute con el Hamiltoniano 4.1.21 para poder separar la variable  $\varphi$ . Este operador corresponde al momento angular total,

$$J = -i\partial_\varphi + \frac{1}{2} \sigma^3 \quad (4.1.26)$$

cuyas autofunciones pueden ser clasificadas por los autovalores  $j \pm \frac{1}{2}$ , es decir,  $l$  y  $l + 1$ . Esto nos lleva a analizar el estado estacionario de la ecuación de Dirac sin masa

utilizando el siguiente ansatz para  $\psi_0$

$$\psi_0 = \exp(-iEt) \begin{pmatrix} u(\rho)e^{il\varphi} \\ \mathbf{v}(\rho)e^{i(l+1)\varphi} \end{pmatrix} \quad (4.1.27)$$

y, reemplazando  $\psi = \exp\left(-\frac{i}{2}(1-\alpha)\sigma^3\varphi - iEt\right) \begin{pmatrix} u(\rho)e^{il\varphi} \\ \mathbf{v}(\rho)e^{i(l+1)\varphi} \end{pmatrix}$  en el Hamiltoniano 4.1.21, obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales

$$\begin{aligned} Eu(\rho) &= -i\partial_\rho \mathbf{v}(\rho) - i\frac{l+1}{\alpha\rho} \mathbf{v}(\rho) \\ E\mathbf{v}(\rho) &= -i\partial_\rho u(\rho) + i\frac{l}{\alpha\rho} u(\rho) \end{aligned} \quad (4.1.28)$$

Despejando  $\mathbf{v}(\rho)$  de la ecuación inferior y reemplazándolo en la ecuación superior tenemos

$$\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} + \frac{1}{\alpha\rho} \frac{du(\rho)}{d\rho} + \left( E^2 - \frac{l^2 + l - \alpha l}{\alpha^2 \rho^2} \right) u(\rho) = 0 \quad (4.1.29)$$

La solución de tal ecuación diferencial es

$$u(\rho) = C_1 \rho^\xi J_\eta(E\rho) \quad (4.1.30)$$

donde  $\xi = \frac{\alpha-1}{2\alpha}$  y  $\eta = \pm \frac{\alpha-2l-1}{2\alpha}$ . Luego podemos obtener la función  $\mathbf{v}(\rho)$  como

$$\mathbf{v}(\rho) = \pm i C_1 \rho^\xi J_{\tilde{\eta}}(E\rho) \quad (4.1.31)$$

donde los signos  $\pm$  corresponden a estados con energía positiva y negativa respectivamente y, además,  $\tilde{\eta} = \pm(\eta + 1)$ . De esta forma, existen dos soluciones independientes para cada estado de energía (positiva o negativa) con  $\eta, \tilde{\eta} > 0$  y  $\eta, \tilde{\eta} < 0$ .

### 4.1.3. Restricciones, condiciones de frontera, densidad de estados y espectro de energía

Analizaremos el caso de estados con energía positiva.  $C_1$  es una constante que puede obtenerse de la normalización de la función de onda. La condición de normalización puede leerse como

$$\int (|u(\rho)|^2 + |\mathbf{v}(\rho)|^2) \sqrt{g} d\rho d\varphi = 1 \quad (4.1.32)$$

reemplazando las funciones  $u(\rho)$ ,  $v(\rho)$  tenemos

$$2\pi\alpha C_1^2 \int_0^{R/\gamma} \rho^{2\xi+1} (J_\eta^2(E\rho) + J_{\eta+1}^2(E\rho)) d\rho = 1 \quad (4.1.33)$$

El comportamiento de las funciones  $u(\rho)$ ,  $v(\rho)$  para  $E\rho \ll 1$  es

$$J_\eta(E\rho) \approx \frac{1}{\Gamma(\eta+1)} \left(\frac{E\rho}{2}\right)^\eta \quad (4.1.34)$$

y

$$J_{\eta+1}(E\rho) \approx \frac{1}{\Gamma(\tilde{\eta}+1)} \left(\frac{E\rho}{2}\right)^{\tilde{\eta}} \quad (4.1.35)$$

reemplazando estas expresiones en la condición de normalización

$$\frac{\pi\alpha C_1^2}{\Gamma(\eta+1)^2} \int_0^{R/\gamma} \rho^{2\xi+1} \left( \left(\frac{E\rho}{2}\right)^{2\eta} + \left(\frac{E\rho}{2}\right)^{2\tilde{\eta}} \right) d\rho = 1 \quad (4.1.36)$$

Analizando la expresión anterior vemos que podemos obtener soluciones regulares para valores pequeños de  $\rho$  imponiendo que las funciones sean cuadrado integrables, es decir, que los exponentes cumplan las siguientes condiciones

$$2\xi + 2\eta + 1 > -1 \quad (4.1.37)$$

y

$$2\xi + 2\eta + 3 > -1 \quad (4.1.38)$$

donde encontramos algunas restricciones para los valores que  $l$  puede adoptar. Podemos ver que  $\alpha \neq 1$  y, teniendo en cuenta que el dominio de  $\varphi'$  en la métrica 4.1.5 es  $0 \leq \varphi' < 2\pi\alpha$ , entonces  $\alpha > 0$ . Como vimos en secciones anteriores  $\alpha = 1 + \theta$ , donde  $\theta = \frac{n_\Omega}{6}$  y  $n_\Omega$  son las cuñas agregadas o removidas en el grafeno. De esta forma vemos que  $\theta > -1$  o, lo que es lo mismo,  $n_\Omega > -6$ . Esto impone  $l < \min(2\theta + 1, 3\theta + 2)$  para  $\eta, \tilde{\eta} > 0$  y  $l > \max(-1 - \theta, 0)$  para  $\eta, \tilde{\eta} < 0$ .

Al integrar la condición de normalización 4.1.33 de manera general, podemos obtener el valor de la constante de normalización  $C_1$

$$2\pi\alpha C_1^2 \int_0^{R/\gamma} \rho^{2\xi+1} (J_\eta^2(E\rho) + J_{\eta+1}^2(E\rho)) d\rho = 1$$

$$2\pi\alpha C_1^2 \frac{E^{2\eta} (R/\gamma)^{2(\xi+\eta+1)} \left( 2^{-2(1-\eta)} \left( \frac{\xi\eta}{2} + \frac{1}{2} \right) + 4^{-\eta} (\eta^3 + (\xi+4)\eta^2 + 5\eta + \xi) \right)}{2(\eta + \xi + 1)(2 + \eta + \xi)\Gamma(\eta + 2)^2} {}_2F_3(\zeta) = 1$$

donde  ${}_2F_3(\zeta)$  es una función hiper-geométrica generalizada con  $\zeta = [\eta + 1 + \xi, \eta + 1/2], [2\eta + 1, \eta + 1, 2 + \eta + \xi], -(R/\gamma)^2 E^2$ . Así, la constante de normalización vale

$$C_1 = \sqrt{\frac{(\eta + \xi + 1)(2 + \eta + \xi)\Gamma(\eta + 2)^2}{\pi\alpha E^{2\eta}(R/\gamma)^{2(\xi+\eta+1)} (2^{-2(1-\eta)} (\frac{\xi\eta}{2} + \frac{1}{2}) + 4^{-\eta} (\eta^3 + (\xi + 4)\eta^2 + 5\eta + \xi)) {}_2F_3(\zeta)}} \quad (4.1.39)$$

Nuestro interés radica en el comportamiento de la función de onda cerca del ápice del cono. Para esto analizamos nuevamente el comportamiento de la función de onda para  $\rho$  pequeño y  $R$  grande y, despreciando términos de órdenes superiores en  $E$ , obtenemos

$$C_1 \sim E^{1/2} \left(\frac{\gamma}{R}\right)^{\xi+1/2} \quad (4.1.40)$$

$$\begin{pmatrix} u(\rho) \\ v(\rho) \end{pmatrix} \sim E^{1/2} \left(\frac{\gamma}{R}\right)^{\xi+1/2} \rho^\xi \begin{pmatrix} (\frac{E\rho}{2})^\eta \\ (\frac{E\rho}{2})^{\tilde{\eta}} \end{pmatrix}$$

donde la dependencia en  $E$  y  $\rho$  para  $\eta, \tilde{\eta} > 0$  es

$$\begin{pmatrix} u(\rho) \\ v(\rho) \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} E^{1/2+\eta} \rho^{\xi+\eta} \\ E^{1/2+\tilde{\eta}} \rho^{\xi+\tilde{\eta}} \end{pmatrix} \quad (4.1.41)$$

y, para  $\eta, \tilde{\eta} < 0$ ,

$$\begin{pmatrix} u(\rho) \\ v(\rho) \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} E^{1/2-\eta} \rho^{\xi-\eta} \\ E^{1/2-\tilde{\eta}} \rho^{\xi-\tilde{\eta}} \end{pmatrix} \quad (4.1.42)$$

o, explícitamente,

$$\begin{pmatrix} u(\rho) \\ v(\rho) \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} E^{\frac{1+2\theta-2l}{2(1+\theta)}} \rho^{\frac{\theta-l}{1+\theta}} \\ E^{\frac{3+4\theta-2l}{2(1+\theta)}} \rho^{\frac{2\theta-l+1}{1+\theta}} \end{pmatrix}, \quad \eta, \tilde{\eta} > 0, \quad l < \text{mín}(2\theta + 1, 3\theta + 2) \quad (4.1.43)$$

$$\begin{pmatrix} u(\rho) \\ v(\rho) \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} E^{\frac{1+2l}{2(1+\theta)}} \rho^{\frac{l}{1+\theta}} \\ E^{\frac{-2\theta+2l-1}{2(1+\theta)}} \rho^{\frac{-\theta+l-1}{1+\theta}} \end{pmatrix}, \quad \eta, \tilde{\eta} < 0, \quad l > \text{máx}(-1 - \theta, 0) \quad (4.1.44)$$

En particular, teniendo en cuenta los términos predominantes, con  $\theta = 0, -1/6, -1/3$ , obtenemos  $l = 0$  y, por lo tanto,  $\psi \sim E^{1/2}$ ,  $\psi \sim E^{2/5} \rho^{-1/5}$ , y  $\psi \sim E^{1/4} \rho^{-1/2}$ , respectivamente. De igual manera, para  $\theta = 1/6, 1/3, 1/2$ , obtenemos  $l = 1$  y  $\psi \sim E^{2/7} \rho^{-1/7}$ ,  $\psi \sim E^{1/8} \rho^{-1/4}$  y  $\psi \sim \rho^{-1/3}$ , respectivamente.

Podemos ver que la densidad local de estados diverge para  $\rho \rightarrow 0$  y es por esto que consideraremos la densidad total de estados en una región  $0 < \rho \leq \delta$  para  $\delta$  pequeño. Para esto, debemos integrar la densidad electrónica en un disco pequeño, dividir el

resultado por  $\Delta k = \pi/\alpha$  y utilizar la siguiente expresión para la densidad local de estados

$$\rho(\mathbf{r}, E) = \sum_i |\psi_i(\mathbf{r})|^2 \delta(E - E_i) \quad (4.1.45)$$

obteniendo

$$DoS = \left( \int_0^{\frac{\delta\gamma}{\gamma R^{\gamma-1}}} u(\rho) d\rho \right)^2 + \left( \int_0^{\frac{\delta\gamma}{\gamma R^{\gamma-1}}} v(\rho) d\rho \right)^2$$

$$DoS \propto \begin{cases} E^{\frac{4\theta-2l+3}{1+\theta}} \delta^{\gamma \frac{6\theta-2l+4}{1+\theta}} & \eta, \tilde{\eta} > 0, \\ E^{\frac{-2\theta+2l-1}{1+\theta}} \delta^{\gamma \frac{2l}{1+\theta}} & \eta, \tilde{\eta} < 0. \end{cases} \quad (4.1.46)$$

Nuevamente, teniendo en cuenta los términos predominantes, resulta

$$DoS \propto \begin{cases} E^{1/2} \delta^\gamma, & \theta = -1/3, \quad l = 0, \\ E^{4/5} \delta^{8\gamma/5}, & \theta = -1/6, \quad l = 0, \\ E \delta^{2\gamma}, & \theta = 0, \quad l = 0, \\ E^{4/7} \delta^{12\gamma/7}, & \theta = 1/6, \quad l = 1, \\ E^{1/4} \delta^{3\gamma/2}, & \theta = 1/3, \quad l = 1, \\ \delta^{4\gamma/3}, & \theta = 1/2, \quad l = 1, \end{cases} \quad (4.1.47)$$

Los modelos presentados en (Osipov and Kochetov, 2001) y (Lammert and Crespi, 2000) predice la misma dependencia en  $E$  y en  $\delta$  en el límite inextensional ( $\sigma = 1/2$ , es decir, una membrana rígida). A su vez, al igual que lo obtenido en (Osipov and Kochetov, 2001), no existen estados extendidos para  $\theta > -1/2$  y sólo pueden existir estados localizados con exponentes en ley de potencia.

Por otro lado, la energía del sistema se puede discretizar considerando la condición de frontera de billar 2.2.344 con un potencial infinito por fuera de  $\rho = R/\gamma$  y con un contorno circular, es decir, con  $\varphi = \alpha$  en la frontera. Tal condición para las componentes del espinor puede leerse como

$$\frac{\psi_2}{\psi_1} = i \exp \{i\varphi\} \quad (4.1.48)$$

donde  $\psi_1 = C_1 \rho^\xi J_\eta(ER/\gamma) \exp(il\varphi)$  y  $\psi_2 = iC_1 \rho^\xi J_{\eta+1}(ER/\gamma) \exp(i(l+1)\varphi)$ , con lo cual obtenemos la siguiente condición de frontera

$$J_\eta(ER/\gamma) = J_{\eta+1}(ER/\gamma) \quad (4.1.49)$$

Teniendo en cuenta que el comportamiento asintótico de las funciones de Bessel para  $ER/\gamma \gg 1$  es

$$J_\eta(ER/\gamma) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi ER/\gamma}} \cos\left(ER/\gamma - \frac{\eta\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \quad (4.1.50)$$

entonces obtenemos una condición de frontera como

$$\cos\left(ER/\gamma - \frac{\eta\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) = \sin\left(ER/\gamma - \frac{\eta\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \quad (4.1.51)$$

donde el argumento debe igualarse a  $\pi/4 + n\pi$  y, de esta forma, obtenemos el espectro de baja energía para el grafeno con presencia de dislocaciones de cuña

$$E = \frac{\pi\gamma}{R} \left( n + \frac{1}{2} + \left| \frac{\alpha - 2l - 1}{4\alpha} \right| \right) \quad (4.1.52)$$

llegando al resultado buscado. Por último, podemos considerar el caso con masa simplemente re-definiendo la energía  $E$  como  $K = \sqrt{E^2 - m^2}$  y extraer la siguiente expresión

$$E^* = \pm \sqrt{E^2 + m^2} \quad (4.1.53)$$

donde  $E$  corresponde a [4.1.52](#).

## Conclusiones

A partir del estudio de los grados de libertad electrónicos del grafeno en presencia de dislocaciones de cuña se pudieron describir las excitaciones de baja energía en dicho material, basado en un enfoque geométrico mediante la aplicación de la ecuación de Dirac en espacio curvo. La presencia de estos defectos introduce una conexión no trivial en la ecuación de Dirac la cual se traduce en un cambio de fase en la función de onda.

La densidad de estados obtenida predice la misma dependencia que otros autores en la energía  $E$ , sin embargo la dependencia en el radio  $\delta$  es diferente debido a la presencia del módulo de Poisson, coincidiendo en el límite inextensional, es decir, cuando dicho módulo adquiere el valor  $1/2$ . Por otra parte, para  $\theta > -1/2$  sólo pueden existir estados localizados con exponentes en ley de potencia.

Finalmente, al adoptar una condición de frontera de tipo billar, se consiguió el espectro de baja energía para el grafeno con presencia de dislocaciones de cuña como función de las propiedades elásticas del medio.

# Referencias

- Arcos, H. I. and Pereira, J. G. (2004). Torsion gravity: a reappraisal. *International Journal of Modern Physics D*, 13(10):2193–2240.
- Bueno, M., Furtado, C., and de M Carvalho, A. (2012). Landau levels in graphene layers with topological defects. *The European Physical Journal B*, 85(2):1–5.
- Carneiro, F., Ulhoa, S., da Rocha-Neto, J., and Maluf, J. (2020). On the quantization of burgers vector and gravitational energy in the space-time of a conical defect. *The European Physical Journal C*, 80(3):1–9.
- Cortijo, A. and Vozmediano, M. A. (2007). Effects of topological defects and local curvature on the electronic properties of planar graphene. *Nuclear Physics B*, 763(3):293–308.
- Cortijo, A. and Vozmediano, M. A. (2009). Minimal conductivity of rippled graphene with topological disorder. *Physical Review B*, 79(18):184205.
- de Juan, F., Cortijo, A., and Vozmediano, M. A. (2007). Charge inhomogeneities due to smooth ripples in graphene sheets. *Physical Review B*, 76(16):165409.
- de Juan, F., Cortijo, A., and Vozmediano, M. A. (2010). Dislocations and torsion in graphene and related systems. *Nuclear physics B*, 828(3):625–637.
- De Juan, F., Cortijo, A., Vozmediano, M. A., and Cano, A. (2011). Aharonov–bohm interferences from local deformations in graphene. *Nature Physics*, 7(10):810–815.
- Furtado, C., De M. Carvalho, A., and de Lima Ribeiro, C. (2006). Aharonov–bohm effect and disclinations in an elastic medium. *Modern Physics Letters A*, 21(17):1393–1403.
- Furtado, C., Moraes, F., and Carvalho, A. d. M. (2008). Geometric phases in graphitic cones. *Physics Letters A*, 372(32):5368–5371.

- Gonzalez, J., Guinea, F., and Vozmediano, M. A. (1993). The electronic spectrum of fullerenes from the dirac equation. *Nuclear Physics B*, 406(3):771–794.
- Guinea, F., Katsnelson, M., and Vozmediano, M. (2008). Midgap states and charge inhomogeneities in corrugated graphene. *Physical Review B*, 77(7):075422.
- Katanaev, M. (2020). The't hooft–polyakov monopole in the geometric theory of defects. *Modern Physics Letters B*, 34(12):2050126.
- Katanaev, M. and Mannanov, I. (2012a). Wedge dislocations and three-dimensional gravity. *P-Adic Numbers, Ultrametric Analysis, and Applications*, 4(1):5–19.
- Katanaev, M. and Mannanov, I. (2012b). Wedge dislocations, three-dimensional gravity, and the riemann-hilbert problem. *Physics of Particles and Nuclei*, 43(5):639–643.
- Katanaev, M. and Volovich, I. (1992). Theory of defects in solids and three-dimensional gravity. *Annals of Physics*, 216(1):1–28.
- Katanaev, M. and Volovich, I. (1999). Scattering on dislocations and cosmic strings in the geometric theory of defects. *Annals of Physics*, 271(2):203–232.
- Katanaev, M. O. (2003). Wedge dislocation in the geometric theory of defects. *Theoretical and mathematical physics*, 135(2):733–744.
- Katanaev, M. O. (2005). Geometric theory of defects. *Physics-Uspekh*, 48(7):675.
- Lammert, P. E. and Crespi, V. H. (2000). Topological phases in graphitic cones. *Physical review letters*, 85(24):5190.
- Mesaros, A., Sadri, D., and Zaanen, J. (2010). Parallel transport of electrons in graphene parallels gravity. *Physical Review B*, 82(7):073405.
- Neto, A. C., Guinea, F., and Peres, N. M. (2006). Drawing conclusions from graphene. *Physics world*, 19(11):33.
- Neto, A. C., Guinea, F., Peres, N. M., Novoselov, K. S., and Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. *Reviews of modern physics*, 81(1):109.
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D.-e., Zhang, Y., Dubonos, S. V., Grigorieva, I. V., and Firsov, A. A. (2004). Electric field effect in atomically thin carbon films. *science*, 306(5696):666–669.

- Osipov, V. A. and Kochetov, E. A. (2001). Dirac fermions on graphite cones. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 73(10):562–565.
- Roberts, M. M. and Wiseman, T. (2022). Curved-space dirac description of elastically deformed monolayer graphene is generally incorrect. *Physical Review B*, 105(19):195412.
- Ruggiero, M. L. and Tartaglia, A. (2003). Einstein–cartan theory as a theory of defects in space–time. *American Journal of Physics*, 71(12):1303–1313.
- Sotiriou, T. P., Li, B., and Barrow, J. D. (2011). Generalizations of teleparallel gravity and local lorentz symmetry. *Physical Review D*, 83(10):104030.
- Tod, K. (1994). Conical singularities and torsion. *Classical and Quantum Gravity*, 11(5):1331.
- Vozmediano, M. A., de Juan, F., and Cortijo, A. (2008). Gauge fields and curvature in graphene. In *Journal of Physics: Conference Series*, volume 129, page 012001. IOP Publishing.
- Wallace, P. R. (1947). The band theory of graphite. *Physical review*, 71(9):622.