



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLÁS
DE HIDALGO

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO
MATEMÁTICAS

MAT. LUIS MANUEL RIVERA GUTIÉRREZ

ESTRUCTURA
SUPERSIMÉTRICA DE LOS
ESTADOS DE LANDAU EN EL
GRAFENO

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
LICENCIADO EN CIENCIAS FÍSICO
MATEMÁTICAS

PRESENTA:

ALYABRA ALEJANDRO VARGAS CHÁVEZ

ASESOR:

DR. ALFREDO RAYA MONTAÑO

MORELIA, NOVIEMBRE



Agradecimientos

Con la totalidad de mi espíritu agradezco a mi familia, en especial el apoyo incondicional brindado por mis hermanos Ismael, Lennin y Vladimir para sumergirme en los misterios del universo, a mi madre por su amor infinito y a mi padre que con su ejemplo me inspira a no rendirme y nunca traicionar mis ideales.

También quiero agradecer a mi asesor Alfredo Raya por su paciencia en guiarme en esta etapa final y a todos mis compañeros y profesores de FisMat los cuales he tenido la fortuna de coincidir y me han apoyaron de una manera indispensable.

Índice general

Agradecimientos	I
Resumen	IV
1. Introducción	1
2. Grafeno	3
2.1. Enlaces del carbono	3
2.2. Estructura cristalina del grafeno	5
2.3. Relación de dispersión	7
2.4. Propiedades del grafeno	12
3. Estados de Landau	14
3.1. Partícula clásica en un campo magnético	14
3.2. Cuantización de Landau	16
3.3. Partícula relativista de espín 0 en un campo magnético	18
3.4. Niveles de Landau en el grafeno	20
3.4.1. Grafeno prístino	20
3.4.2. Grafeno con estiramiento uniaxial uniforme	21
3.4.3. Grafeno bajo una deformación no uniforme	24
4. Estructura supersimétrica en el grafeno	28
4.1. Mecánica cuántica supersimétrica	28
4.2. Grafeno prístino	31
4.3. Grafeno deformado uniaxial y uniformemente	33
4.4. Grafeno bajo deformación no uniforme	34
5. Conclusiones	36
A. Mecánica cuántica relativista	39
A.1. Ecuación de Klein-Gordon	39
A.1.1. Matrices de Pauli	42

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	III
A.2. Ecuación de Dirac	42
A.2.1. Ecuación de Dirac en (3+1) dimensiones	42
A.2.2. Ecuación de Dirac en (2+1) dimensiones	45
B. Oscilador armónico cuántico	46
B.1. Unidades naturales	46
B.2. Solución algebraica del oscilador armónico cuántico	47

Resumen

Este trabajo gira en torno a las peculiares características del grafeno, en especial a sus propiedades electrónicas en presencia de campos magnéticos. Debido a su estructura cristalina hexagonal, los portadores de carga del grafeno exhiben una relación lineal de energía-momento cerca de las esquinas de la Zona de Brillouin. Por lo anterior, a bajas energías éstos adquieren un comportamiento como si se tratasen de fermiones de Dirac sin masa, donde la velocidad de Fermi juega el papel de la velocidad de la luz, presentando así efectos pseudorelativistas. En esta tesis estudiamos los estados de Landau en el grafeno, los cuáles se diferencian del espectro usual que encontramos en los semiconductores ordinarios y que son consistentes con los estados relativistas (pseudos) de Landau. También, cuando el grafeno es sometido a deformaciones mecánicas provoca cambios en sus propiedades esto se observa en la modificación de los estados de Landau antes descritos, que aún poseen una simetría algebraica notable. Al final de la tesis, estudiamos la estructura supersimétrica en el sentido de la mecánica cuántica (MC-SUSY) de este sistema con el fin de ver si la estructura SUSY se conserva o se rompe cuando el grafeno es sometido a esfuerzos mecánicos lo cual es el aporte original de esta tesis.

Palabras clave: *fermiones de Dirac sin masa, campos magnéticos, deformaciones mecánicas, mecánica cuántica, estructura supersimétrica.*

Abstract

This work deals with the peculiar features of graphene, specially its electronic properties in the presence of magnetic fields. Due to its hexagonal crystalline structure, charge carriers exhibit a linear energy-momentum dispersion relation near the corners of the Brillouin Zone. For the above, at low energies these particles behave as if they were massless Dirac fermions, where the speed of Fermi play the role of the speed of light, showing in this form pseudorelativistic effects. In this thesis we study the Landau states in graphene, which are different from the usual spectrum we found in ordinary semiconductors and which are consistent with (pseudo) relativistic Landau states. Moreover, when graphene is subject to strain, its properties are modified. This is observed in modifications to the Landau states previously described which still posses a remarkable algebraic symmetry. At the end, we study the supersymmetric structure in the sense of quantum mechanics (SUSY-QM) for this system with the goal of studying whether the SUSY structure is preserved or broken in graphene under strain, this is an original contribution of this thesis.

Keywords: *massless Dirac fermions, magnetic fields, strain, quantum mechanics, supersymmetric structure .*

Capítulo 1

Introducción

El grafeno es una forma alotrópica bidimensional de carbono de tan solo un átomo de espesor. Las primeras muestras de grafeno se obtuvieron en 2004 rebasando las imposibilidades teóricas que se conocían para aislar un cristal de tales dimensiones. Este material goza de sorprendentes características, como su conductividad térmica y eléctrica, que lo han colocado en el centro de grandes proyectos, los cuales no solo se han limitado a sus prometedoras aplicaciones nanotecnológicas, pues su particular arreglo hexagonal como panal de abejas, produce que sus portadores de carga tengan una relación de dispersión (energía-momento) lineal a bajas energías cerca de las esquinas de la primera zona de Brillouin (también conocidos como puntos de Dirac), característico de fermiones de Dirac sin masa (ultrarelativistas), solo que en la física de grafeno la velocidad de Fermi juega el rol de la velocidad de la luz. Este comportamiento pseudo-relativista lo hace además un sistema atractivo para estudiar ciertos fenómenos físicos concernientes a la física de altas energías.

En esta tesis exploramos algunos efectos (pseudo) relativistas de los portadores de carga sujetos a la influencia de campos magnéticos a partir de la estructura analítica de sus correspondientes estados de Landau. Para ello, hemos organizado el resto de esta tesis de la siguiente manera: En el Capítulo 2 resaltaremos algunas de las principales características del grafeno, en especial aquellas que se deducen a partir de su estructura cristalina como son el surgimiento de un (pseudo) spin, su particular estructura de bandas que lo hace un semiconductor de brecha energética cero y el Hamiltoniano efectivo en el régimen de bajas energías que relacionamos con el Hamiltoniano de Dirac para partículas ultrarelativistas.

En el Capítulo 3 nos centramos en estudiar los estados para los portadores de carga bajo la influencia de campos magnéticos, de donde obtendremos los estados de Landau y sus correspondientes niveles, que surgen de la cuantización de las órbitas de las partículas cargadas eléctricamente en presencia de cam-

pos magnéticos. Dividimos nuestro estudio en los casos que encontramos en el grafeno, que son el caso prístino, grafeno sometido a deformaciones uniformes uniaxiales y grafeno bajo esfuerzos no uniformes. En este último caso encontramos que las deformaciones producen campos pseudo-magnéticos. La forma analítica de estos estados sugiere una estructura algebraica que exploramos en detalle.

En el Capítulo 4 realizamos una breve revisión de la mecánica cuántica supersimétrica. La estructura de los estados y energías de dos sistemas compañeros supersimétricos la encontramos en los estados de Landau de los portadores de carga del grafeno ideal. En este capítulo exploramos las condiciones bajo las cuales dicha estructura se preserva en los espectros cuando el grafeno es sometido a deformaciones uniformes uniaxiales y no uniformes, que es un aporte original de esta tesis.

Finalmente, en el Capítulo 5 presentamos las conclusiones que se desprenden de este trabajo. La tesis está complementada con un apéndice sobre las principales nociones de la Mecánica Cuántica Relativista y otro sobre el tratamiento algebraico del problema del oscilador armónico cuántico unidimensional, herramientas a las que recurriremos frecuentemente a lo largo de esta tesis.

Capítulo 2

Grafeno

Las propiedades físicas de los cristales puros dependen de la forma alotrópica que posean. De esta manera, el carbono es duro y transparente con la estructura tetrahédrica del diamante, que contrasta con lo oscuro y suave que identifica al carbono en forma de grafito, formado por un arreglo apilado de capas con átomos agrupados en hexágonos fuertemente enlazados. De manera análoga, los materiales guardan sorpresas cuando son estudiados en muestras de tamaño nanométrico como lo es el grafeno, una monocapa de grafito de un solo átomo de espesor, considerándose un material bidimensional ¹ que ostenta interesantes propiedades. En este capítulo estudiamos algunas de ellas.

2.1. Enlaces del carbono

El carbono es el elemento base de la vida en la Tierra. Es el sexto elemento de la tabla periódica, de ahí que tenga 6 electrones orbitando alrededor de su núcleo. En la configuración electrónica $1s^2 2s^2 2p^2$, dada la cercanía de los electrones de la primera capa $1s$ al núcleo, éstos están fuertemente atados a él, de ahí que se desprecien al momento de formar enlaces.

Cuando los átomos se constituyen en sólidos, la energía disminuye debido a la superposición de las funciones de onda. Este cambio de energía puede ser suficiente para promover un electrón del orbital $2s$ a un estado de $2p$, produciendo la formación de 4 estados equivalentes que en la literatura se suelen denotar por $|1s\rangle$, $|2p_x\rangle$, $|2p_y\rangle$ y $|2p_z\rangle$ [1]. Estos estados se pueden mezclar, produciendo la formación de orbitales híbridos. Dependiendo del número de orbitales que participan en la combinación, será el tipo de hibridación. Así, una superposición del

¹Por cada dimensión de algún material que sea del orden de los nanómetros o menor, se consideran que se reducen en una dimensión.

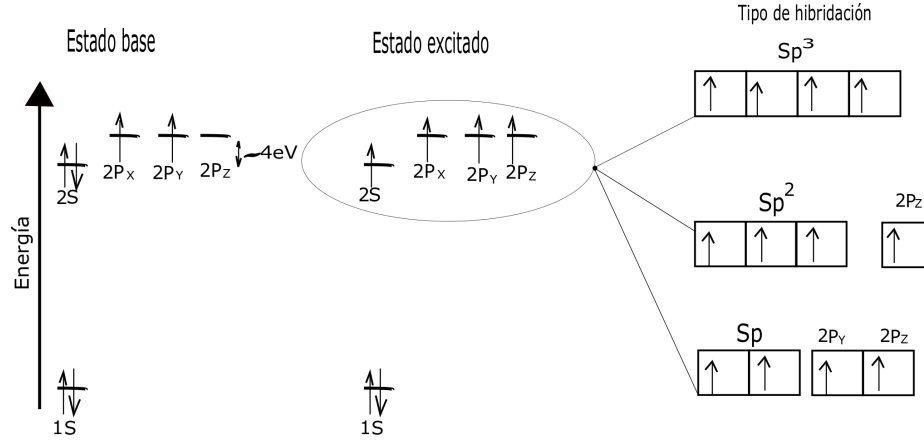


Figura 2.1: Un electrón de la capa $2s$ en el estado base se promueve al estado $2p_z$ con un aumento de energía aproximada de 4 eV . Se producen 4 posibles estados equivalentes que dan origen a diferentes tipos de hibridación, dependiendo de los electrones p que participen.

estado $|2s\rangle$ con n estados $|p_i\rangle$ se conoce como una hibridación $|sp^n\rangle$ (ver Figura 2.1). Esta teoría de hibridación inicialmente elaborada por Linus Pauling [2] explica, entre muchas cosas, la versatilidad del carbono para formar compuestos químicos.

En el caso del diamante, se tiene una hibridación sp^3 , por lo que los 4 estados se mezclan, formando orbitales en un ángulo de $109,5^\circ$ (ver Figura 2.2). A estos orbitales se deben los enlaces σ , que son los enlaces covalentes más fuertes debido a su mayor traslape de los orbitales, lo que hace del diamante uno de los materiales más resistentes.

La hibridación sp^2 se presenta en la formación del grafito, tomando la hibridación de los estados $|2s\rangle$, $|2p_x\rangle$ y $|2p_y\rangle$. Los orbitales están orientados en el plano xy , formando ángulos de 120° entre ellos, creando enlaces coplanares σ que unen fuertemente a los átomos con sus tres primeros vecinos del plano. Esto otorga rigidez a cada capa del grafito, mientras que el electrón del estado $|p_z\rangle$ que permanece sin hibridar, queda perpendicular al plano, enlazándose a los átomos de la capa subsiguiente con enlaces de tipo π , que es mucho más débil. Esto permite usarlo en la punta de un lápiz, pues las capas se pueden deslizar con relativa facilidad.

El grafeno es una sola capa de las que constituyen al grafito, es decir, posee una hibridación del tipo sp^2 . Por lo tanto, sus enlaces σ brindan sus propiedades mecánicas, mientras que sus electrones del enlace π son los encargados de sus propiedades electrónicas.

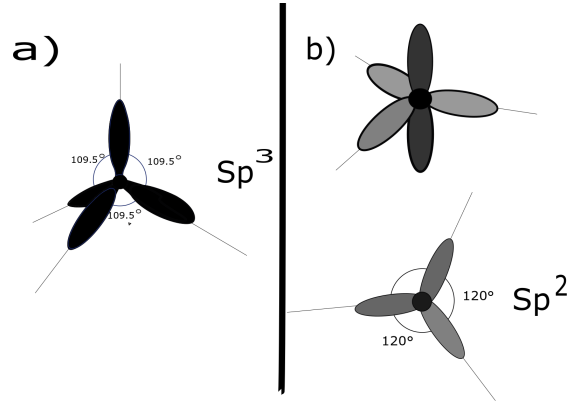


Figura 2.2: a) En la hibridación sp^3 , los orbitales forman ángulos de $109,5^\circ$ entre sí, produciendo una estructura tetrahédrica. b) En la hibridación sp^2 , los orbitales híbridos yacen sobre un plano, en ángulos de 120° , mientras que el electrón que permanece sin hibridar forma un orbital perpendicular al plano.

Aunque el grafeno ya se conocía como elemento constitutivo del grafito y posteriormente de los cristales en una dimensión, los nanotubos de carbón en 1991 ² [3] y en materiales de dimensión 0, los furelenos en 1985 [4] (ver Figura 2.3), fue hasta 2004 que los científicos de origen ruso Andre Geim y Konstantin Novoselov lograron aislar las primeras muestras de grafeno [5]. Esto a pesar de supuestas imposibilidades teóricas de la estabilidad de un cristal bidimensional analizadas por Landau [6] y Mermin [7], que predecían que las fluctuaciones térmicas producirían desplazamientos atómicos del orden de las distancias interatómicas, lo que haría de éstos cristales estructuras inestables. No obstante, el grafeno se encuentra intrínsecamente corrugando, logrando superar tales obstáculos termodinámicos [8].

2.2. Estructura cristalina del grafeno

La red hexagonal del grafeno no es una red de Bravais, pues como se aprecia en la Figura 2.4, un nodo de la red no es equivalente a sus nodos vecinos más cercanos ³. Debido a esto, pensamos en la red hexagonal como una red bipartita, de dos subredes de Bravais triangulares A y B (ver Figura 2.4). Podemos tomar

²Ya había reportes de nanotubos de carbón, sin embargo, no les habían dado la importancia debida.

³No son equivalentes debido a que tienen diferente perspectiva de red.

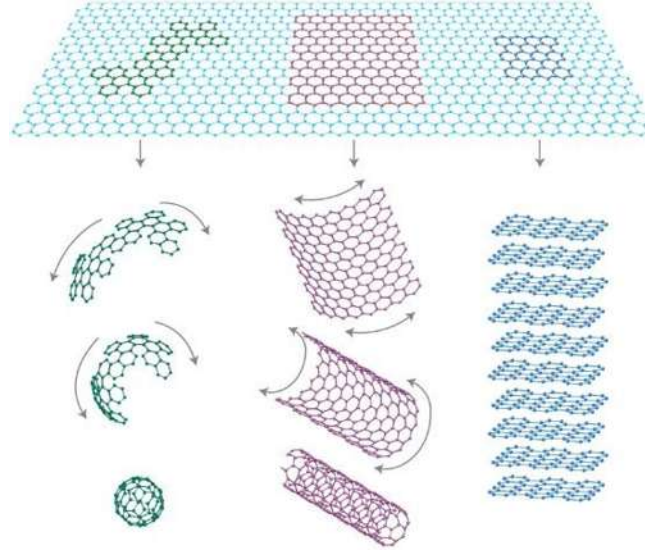


Figura 2.3: El grafeno se envuelve para formar fulerenos, se enrolla para formar nanotubos de carbono, y se apila en el grafito. Figura tomada de la Ref. [9].

a los vectores base de la red triangular como

$$a_1 = \frac{a}{2} (3i + \sqrt{3}j), \quad a_2 = \frac{a}{2} (3i - \sqrt{3}j), \quad (2.1)$$

donde $a \approx 1,42\text{\AA}$ es la distancia entre vecinos cercanos. Con esta base, podemos escribir todos los puntos de la misma subred por una combinación lineal de ellos

$$T = na_1 + ma_2, \quad (2.2)$$

donde n y m son números enteros. Cada átomo perteneciente a la subred A está rodeado por tres átomos de la subred B y viceversa. Los vectores que conectan a un átomo de tipo B con sus vecinos más cercanos están dados por

$$\delta_1 = \frac{a}{2} (i + \sqrt{3}j), \quad \delta_2 = \frac{a}{2} (i - \sqrt{3}j), \quad \delta_3 = -a i.$$

Con ellos, podemos saltar mediante una traslación a los vectores de la red complementaria mediante

$$T = na_1 + ma_2 - \delta_3. \quad (2.3)$$

Esta es la manera de relacionar las dos subredes triangulares de Bravais que describen al arreglo hexagonal del grafeno.

Toda red real en la cristalografía tiene asociada una red recíproca también conocida como espacio de Fourier, espacio de momentos o espacio de fases, cuyos nodos corresponden a las direcciones donde se puede observar la difracción de rayos X [10]. Los vectores base b_i en el espacio de momentos deben de satisfacer la relación siguiente

$$a_i \cdot b_j = 2\pi\delta_{ij}. \quad (2.4)$$

En el caso de una red triangular, la red recíproca es también triangular. Esto también es cierto para el arreglo hexagonal. Podemos elegir los vectores base como

$$b_1 = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}\hat{i}, \quad b_2 = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}}\hat{i} + \frac{2\pi}{a}\hat{j}. \quad (2.5)$$

Ahora, la primera zona de Brillouin, que es importante debido a que las ondas en un cristal pueden ser escritas por ondas de Bloch ⁴ dentro de ella, es una celda Wigner-Seitz en el espacio recíproco, la cual se construye en dos sencillos pasos:

- Se dibujan líneas que unan los nodos con los nodos próximos.
- Se trazan las mediatrices de los segmentos anteriores.

La zona más pequeña encerrada por las mediatrices constituye la primera zona de Brillouin. En el caso del grafeno, la zona de Brillouin es también hexagonal rotada 90 grados con respecto a la real (ver Figuras 2.4 y 2.5). En la zona de Brillouin del grafeno existen puntos especiales conocidos como puntos de alta simetría K , K' y M dados por

$$K' = \frac{2\pi}{3a}\hat{i} + \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\hat{j}, \quad K = \frac{2\pi}{3a}\hat{i} - \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\hat{j}, \quad M = \frac{2\pi}{3a}\hat{i}. \quad (2.6)$$

Los puntos de alta simetría K y K' , se encuentran en las esquinas del hexágono de la primera zona de Brillouin. Las demás esquinas se obtienen a través de traslaciones de estos puntos, también conocidos como puntos de Dirac y que son el origen de las propiedades trascendentales que tiene el grafeno, como explicamos en el cálculo de la estructura de bandas.

2.3. Relación de dispersión

Como hemos mencionado, la hibridación sp^2 permite tener tres enlaces covalentes σ que dan rigidez al grafeno. Siendo que estos enlaces son irrelevantes para las propiedades electrónicas del material, las cuales recaen en el electrón

⁴Es la forma de las funciones periódicas dentro de los cristales.

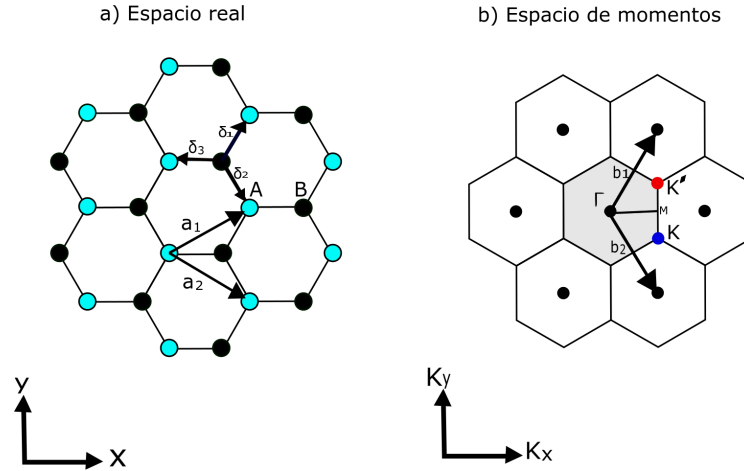


Figura 2.4: *a)* La red de Bravais del grafeno se conforma por dos redes triangulares de Bravais, los vectores a_i son la base de cada red y los vectores δ_i conectan los átomos con los de su red complementaria, también se aprecia que la frontera del grafeno puede ser de dos tipos: *zig-zag*, correspondientes a las fronteras transversales y *arm-chair*, correspondientes a las fronteras verticales. *b)* Los vectores recíprocos b_i crean una zona de Brillouin hexagonal en donde sus esquinas encontramos los puntos de Dirac K y K' .

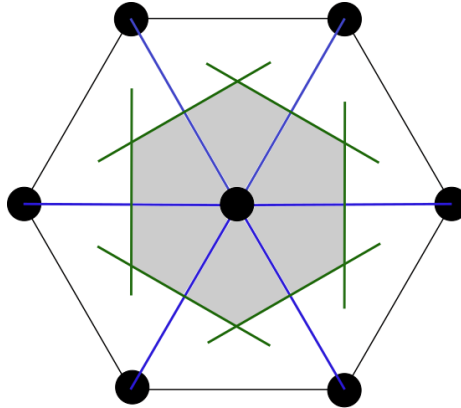


Figura 2.5: Construcción de una celda Wigner-Seitz en una red de Bravais triangular.

del enlace que permanece sin hibridar p_z del enlace π , despreciamos a los electrones ocupados en los enlaces σ en el cálculo de la estructura de bandas del grafeno.

La primera descripción de la estructura de bandas de una monocapa de grafito fue hecha por el físico Wallace en 1947 [11] utilizando el modelo de amarre fuerte (Tight-binding en inglés), el cual toma una combinación lineal de las funciones de onda de los átomos aislados. Nosotros realizaremos la aproximación a primeros vecinos. Por lo tanto, para la función de onda del electrón π de la red A o B se toman en consideración solamente los tres primeros vecinos, los cuales pertenecen a la red complementaria B o A , respectivamente. Así, se espera que el salto de un electrón vaya sólo a alguno de sus tres átomos vecinos. Por lo anterior y basándonos en la Figura 2.4, las ecuaciones de Schrödinger en la aproximación de amarre fuerte son

$$\begin{aligned} E\psi_A(r_A) &= t\psi_B(r_B) + t\psi_B(r_B - a_2) + t\psi_B(r_B - a_1), \\ E\psi_B(r_B) &= t\psi_A(r_A) + t\psi_A(r_A + a_1) + t\psi_A(r_A + a_2), \end{aligned} \quad (2.7)$$

donde t es la integral de salto entre primeros vecinos, que por argumentos de simetría, tiene el mismo valor. Experimentalmente se sabe que para el caso del grafeno $t \approx -2.97\text{eV}$ [12].

Por otro lado, el teorema de Bloch dice que para una función de onda en un potencial periódico con periodicidad T se cumple que

$$\psi(r + T)_k = e^{k \cdot T} \psi(r)_k, \quad (2.8)$$

y de la Figura 2.4 observamos que $a_1 = -\delta_3 + \delta_1$ y $a_2 = -\delta_3 + \delta_2$, por lo que podemos escribir las ecuaciones de Schrödinger para los estados π de los átomos correspondientes a cada subred de la forma siguiente

$$E\psi_A(r_A) = t\psi_B(r_B) + te^{k \cdot (\delta_3 - \delta_2)}\psi_B(r_B) + te^{k \cdot (\delta_3 - \delta_1)}\psi_B(r_B) \quad (2.9)$$

$$E\psi_B(r_B) = t\psi_A(r_A) + te^{k \cdot (-\delta_3 + \delta_1)}\psi_A(r_A) + te^{k \cdot (-\delta_3 + \delta_2)}\psi_A(r_A). \quad (2.10)$$

Multiplicando por $e^{-k \cdot \delta_3}$ a (2.9) y por $e^{k \cdot \delta_3}$ a (2.10), tenemos

$$Ee^{-k \cdot \delta_3}\psi_A(r_A) = te^{-k \cdot \delta_3}\psi_B(r_B) + te^{-k \cdot \delta_2}\psi_B(r_B) + te^{-k \cdot \delta_1}\psi_B(r_B),$$

$$Ee^{k \cdot \delta_3}\psi_B(r_B) = te^{k \cdot \delta_3}\psi_A(r_A) + te^{k \cdot \delta_1}\psi_A(r_A) + te^{k \cdot \delta_2}\psi_A(r_A).$$

Estas expresiones pueden describirse a partir de un Halmitoniano matricial 2×2 de la forma siguiente [12]

$$\hat{H}(k) \begin{bmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & t \sum_{\delta} e^{-ik \cdot \delta} \\ t \sum_{\delta} e^{ik \cdot \delta} & 0 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{bmatrix}. \quad (2.11)$$

La ecuación anterior (2.11) se puede diagonalizar de manera directa elevando al cuadrado el Halmitoniano, de donde obtenemos la relación de dispersión

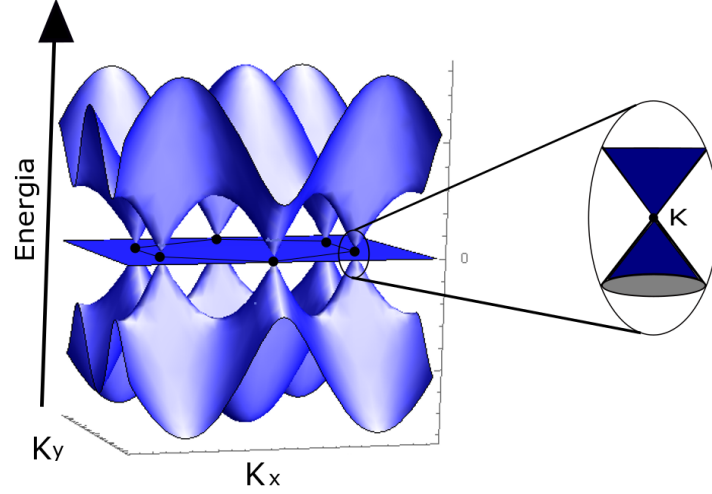


Figura 2.6: Las bandas de conducción y de valencia del grafeno se tocan solamente en los puntos de Dirac, formando un semiconductor con brecha energética 0.

siguiente ⁵

$$\begin{aligned}
 E_{\pm} &= \pm t \left| \sum_{\delta} e^{ik \cdot \delta} \right| \\
 &= \pm t \sqrt{3 + \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos(\sqrt{3}k_y a/2) \cos(3k_x a/2)}. \quad (2.12)
 \end{aligned}$$

La banda de energía positiva corresponde a la banda de conducción, la cual denotamos con π , mientras que la banda de energía negativa corresponde a la banda de valencia, la cual denotamos como π^* . Como se aprecia en la Figura 2.6, las dos bandas se acercan en forma de conos (valles de Dirac), tocándose en sólo en los puntos de Dirac, donde la energía es $E_{\pm}(K) = E_{\pm}(K') = 0$. Es ocurre en las 6 esquinas de la primera zona de Brillouin. Por tanto, su superficie de Fermi es dimensión 0 y tiene energía de Fermi $E_F = 0$ ⁶. Por lo anterior, el grafeno

⁵La relación de dispersión consiste en escribir la energía en términos de los vectores de onda en el espacio de momentos.

⁶La energía de Fermi es la energía del nivel más alto ocupado por un sistema cuántico a temperatura 0°K.

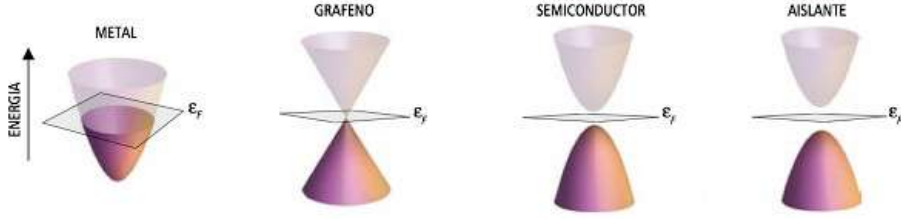


Figura 2.7: De acuerdo a la teoría de bandas, en un conductor las bandas de valencia y de conducción se traslapan, en los aislantes existe una brecha grande entre las dos bandas conocida como banda prohibida, y en los semiconductores tienen una banda prohibida pequeña. Figura tomada de [13].

se considera como un semiconductor de brecha energética cero. Podemos ver la comparación visual entre conductores o aislantes de acuerdo con la teoría de bandas en la Figura 2.7.

Expandiendo el Halmitoniano (2.11) en serie de Taylor alrededor de los puntos de Dirac $K = k + q$ con $|q| \ll |k|$, se tiene [12]

$$H_{K,K'} = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & q_x \mp iq_y \\ q_x \pm iq_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

con

$$v_F = \frac{3at}{2\hbar} \simeq \frac{1}{300}c. \quad (2.14)$$

Esta aproximación es correcta a bajas energías, menores de 1 eV [14]. La ecuación (2.13) se puede comparar con la ecuación de Dirac para electrones ultrarelativistas en 2D (ver apéndice A), que, aunque no es la misma conceptualmente, tiene la misma forma con la diferencia que la velocidad de la luz es remplazada por la velocidad de Fermi. Asignando los operadores de momento, el Halmitoniano efectivo cerca de los puntos de Dirac queda

$$\hat{H}_K = -i\hbar v_F \vec{\sigma} \nabla = v_F (P \cdot \sigma), \quad (2.15)$$

$$\hat{H}_{K'} = \sigma_1 \hat{H}_K \sigma_1 = \hat{H}_K^T. \quad (2.16)$$

El Halmitoniano completo que incluye a ambas subredes y los dos puntos especiales K , consiste en una matriz 4×4 , que escribimos por bloques de 2×2 ,

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{H}_K & 0 \\ 0 & \hat{H}_{K'} \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

Los cuadri-espinores columna son de la forma

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_{KA} \\ \psi_{KB} \\ \psi_{K'A} \\ \psi_{K'B} \end{pmatrix}, \quad (2.18)$$

donde ψ_{KA} corresponde al valle K y a la subred A , análogo con las otras etiquetas.

Si se realiza la aproximación de amarre fuerte a segundos vecinos, se añade a la relación de dispersión otro término de la forma [11]

$$E(\vec{k}) = \mp \left| \sum_{\delta} e^{i\vec{k} \cdot \delta} \right| + t' f(\vec{k}),$$

con

$$f(\vec{k}) = 2 \cos(\sqrt{3}k_x a) + 4 \cos(\sqrt{3}k_x a/2) \cos(3k_y a/2),$$

que rompe la simetría de $E = 0$ al mínimo $E = 3t'$ en los puntos K . Sin embargo, esto no cambia el comportamiento del Hamiltoniano cerca de ellos [12].

Recientes cálculos computacionales de la estructura de bandas de los enlaces σ y π se muestran en la Figura 2.8, donde se grafica a lo largo de un corte por las líneas de simetría. Observamos que los enlaces σ tienen grandes zonas prohibidas, mientras que las bandas del enlace π se siguen tocando en un punto.

2.4. Propiedades del grafeno

El grafeno sorprende por sus excepcionales características. Aquí mencionaremos algunas de las más notables: Es uno de los mejores conductores de calor [16], incluso superior al diamante; tiene una alta movilidad electrónica, mayor a la del silicio; su velocidad de Fermi es unas 300 veces menor que la velocidad de la luz en el vacío $v_F \approx 10^6$ [17]; es 100 veces más fuerte que el acero [18], y, sin embargo, es altamente flexible [19]; su alta densidad lo hace impermeable a todos los gases, pues incluso el Helio no lo puede atravesar [20]; es casi transparente, pues absorbe el 2.3 % de la luz [21,22] en el espectro visible. Además, el interés en el grafeno no se limita a sus prometedoras aplicaciones tecnológicas, sino también al interés en la ciencia pura, pues encontramos fenómenos como efecto Hall cuántico anómalo a temperatura ambiente [23]; una relación de dispersión lineal en la proximidad de los puntos de Dirac, que lo convierten en un puente natural entre la física del estado sólido y la física de partículas, permitiéndonos estudiar en este material fenómenos cuánticos relativistas como la penetración sin obstáculos de partículas a través de altas y anchas barreras de potencial. Este fenómeno es conocido como la Paradoja de Klein [24,25]. Otros fenómenos como la generación dinámica de masas [26], el mecanismo de Schwinger [27],

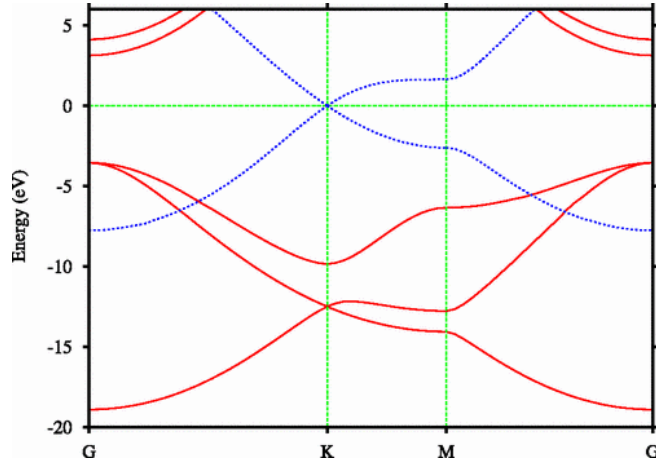


Figura 2.8: En esta figura se muestra un corte a lo largo de las líneas de simetría de la estructura de bandas de los enlaces σ y π del grafeno, que van del centro de la zona de Brillouin (G) a sus esquinas (K), y luego al punto medio de sus lados, para regresar a su centro de nuevo. La línea punteada corresponde al enlace π lo cual se cruza en los puntos de Dirac, a diferencia de las bandas de los enlaces σ tienen grandes bandas prohibidas. Figura tomada de la Ref. [15].

efectos de curvatura [28] y otros hacen de este material un excelente laboratorio teórico para estudiar aspectos de la física de altas energías.

En el siguiente capítulo estudiaremos el comportamiento de los portadores de carga en el grafeno bajo la influencia de un campo magnético.

Capítulo 3

Estados de Landau

Los estados de Landau surgen a partir de la cuantización de las órbitas de las partículas eléctricamente cargadas en presencia de campos magnéticos. En esta tesis estamos interesados en el comportamiento de las partículas portadoras de cargas cuyo movimiento se encuentra restringido a dos dimensiones. En este capítulo, empezamos con la descripción determinista de la mecánica clásica. Posteriormente, saltamos a la visión probabilista de la mecánica cuántica no relativista para finalizar con la mecánica cuántica relativista, caso que encontramos en los portadores de carga del grafeno. Todos estos sistemas tienen la peculiaridad de que las ecuaciones de movimiento se reducen a la forma de un oscilador armónico cuántico unidimensional, cuyas frecuencia depende del sistema bajo estudio. Además, estudiamos cómo los estados de Landau y sus correspondientes niveles de energía cambian en el grafeno cuando éste es sometido a deformaciones mecánicas.

3.1. Partícula clásica en un campo magnético

En la mecánica clásica, las partículas obedecen las leyes de Newton, las cuales logran predecir sus trayectorias en todo instante, consiguiendo así una descripción determinista del sistema. Para el estudio en la mecánica clásica, consideramos una partícula con carga q y velocidad v en presencia de un campo magnético de intensidad B . Esta partícula experimenta una fuerza debida a la ley de la Fuerza de Lorentz

$$\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B}, \quad (3.1)$$

que combinada con la segunda ley de Newton, nos permite obtener la ecuación de movimiento

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = q\vec{v} \times \vec{B},$$

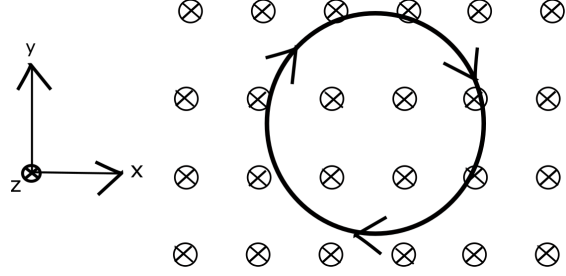


Figura 3.1: El movimiento de una carga bajo la influencia del campo magnético uniforme provoca un movimiento circular.

donde m es la masa de la partícula. Si el campo magnético es uniforme y paralelo al eje z , es decir, $\vec{B} = B_0 \hat{k}$, escribimos la relación anterior de la forma

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = q \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \dot{x} & \dot{y} & \dot{z} \\ 0 & 0 & B_0 \end{vmatrix} = q(\dot{y}B_0, -\dot{x}B_0, 0),$$

donde el punto indica la derivada temporal. La ecuación anterior se puede separar en el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales acopladas

$$\begin{aligned} \ddot{x} &= \frac{qB_0}{m} \dot{y}, \\ \ddot{y} &= -\frac{qB_0}{m} \dot{x}, \\ \ddot{z} &= 0. \end{aligned} \tag{3.2}$$

Podemos apreciar que el campo magnético no produce fuerza alguna en su dirección paralela, por lo que la partícula se comporta como si estuviera libre en esta dirección. Toda la influencia del campo está en su plano transversal. Esto es consistente con el tratamiento restringido al plano que consideraremos a lo largo de esta tesis. Con las condiciones iniciales adecuadas ($v_x(t=0) = 0$ y $v_y(t=0) = v$), la solución del sistema de ecuaciones en (3.2) es

$$\begin{aligned} x(t) &= -R \cos(\omega t) + x_0, \\ y(t) &= R \sin(\omega t) + y_0, \end{aligned}$$

donde $\omega = qB_0/m$ se conoce como frecuencia del ciclotrón. La partícula describe una circunferencia centrada en (x_0, y_0) , de radio $R = vm/qB_0$ rotando en dirección contraria a las manecillas del reloj cuando $B_0 > 0$ (ver Figura 3.1).

3.2. Cuantización de Landau

Ahora abordaremos el problema de la sección anterior dentro del contexto de la mecánica cuántica, para lo cual debemos reformular la descripción del sistema desde el formalismo del espacio fase. Partimos del Lagrangiano de un sistema electromagnético, que se puede expresar como [29]

$$L = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 + q \dot{\vec{r}} \cdot \vec{A} - q\phi, \quad (3.3)$$

donde $\vec{A}$ y ϕ se conocen como potencial vectorial y escalar, respectivamente. Estos potenciales se relacionan con el campo electromagnético mediante las conocidas relaciones ¹

$$\begin{aligned} \vec{B} &= \nabla \times \vec{A}, \\ \vec{E} &= -\nabla\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}. \end{aligned}$$

Otro elemento necesario para proceder es el momento canónico $\vec{P}$ que se calcula a partir de la definición como

$$\vec{P} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}} = m\dot{\vec{r}} + q\vec{A}. \quad (3.4)$$

Es importante resaltar que en este sistema, el momento canónico difiere del momento mecánico $\vec{\pi} = m\vec{v}$. El siguiente paso es obtener el Halmitoniano a partir del Lagrangiano. Recordemos que éstos están relacionados a través de una transformación de Legendre de la siguiente manera

$$H = \vec{P} \cdot \dot{\vec{r}} - L. \quad (3.5)$$

De la Ec. (3.4) se tiene que $\dot{\vec{r}} = \frac{1}{m}(\vec{P} - q\vec{A})$, con el cual podemos obtener el Halmitoniano

$$\begin{aligned} H &= \vec{P} \cdot \frac{1}{m}(\vec{P} - q\vec{A}) - \frac{1}{2m}(\vec{P} - q\vec{A})^2 - \frac{q}{m}(\vec{P} - q\vec{A}) \cdot \vec{A} + q\phi \\ &= \frac{1}{2m}(\vec{P}^2 - 2q\vec{P} \cdot \vec{A} + q^2 \vec{A}^2) + q\phi \\ &= \frac{1}{2m}(\vec{P} - q\vec{A})^2 + q\phi. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Este Halmitoniano está expresado en términos del potencial escalar y vectorial y no de los campos eléctrico y magnético. Debido a esto, la descripción del

¹La forma de elegir $\vec{A}$ y ϕ no es única. Una elección de este conjunto se conoce como norma (gauge) y está relacionado con otra norma mediante una transformación de norma. La demostración de la equivalencia entre las normas está, por ejemplo, en [30].

sistema depende de la elección de ellos, pero las cantidades físicas medibles no son afectadas por su elección.

Para construir el modelo cuántico del sistema, trataremos el caso de un electrón sin espín en un campo magnético ($\phi = 0$ y $q = -e$). De esta manera, el Halmitoniano se reduce a

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{P} + e\vec{A} \right)^2. \quad (3.7)$$

Ahora que tenemos el Halmitoniano con la información del campo ², se procede a la cuantización del sistema sustituyendo las variables canónicas por los operadores correspondientes que actúan sobre una función de onda, es decir,

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{P} + e\hat{A})^2. \quad (3.8)$$

Por simplicidad, elegimos el potencial vectorial en la norma de Landau $\hat{A} = B_0(0, \hat{x}, 0)$, que brinda un campo magnético uniforme en dirección $\hat{z}$ como fácilmente se puede comprobar:

$$\vec{B} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & B_0 x & 0 \end{vmatrix} = B_0 \hat{k}.$$

Con esta elección de $\hat{A}$, podemos escribir el Halmitoniano (3.8) como

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{P}_x)^2 + \frac{1}{2m} (\hat{P}_y + eB_0\hat{x})^2. \quad (3.9)$$

Debido a que no aparece $\hat{y}$ en el Halmitoniano, se tiene que $[\hat{P}_y, \hat{H}] = 0$ ³, lo cual implica que $\hat{P}_y$ es una cantidad conservada. Debido a esto, podemos factorizar la función de onda como el producto de una onda plana en dirección $\hat{y}$ y una función que sólo depende de x , $\phi(x)$

$$\Phi(x, y) = e^{ipy} \phi_k(x) = e^{ik} \phi_k(x). \quad (3.10)$$

Cuando opera $\hat{P}_y$ sobre la función de onda (3.10) tenemos

$$\hat{P}_y \Phi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} e^{iky} \phi_k(x) = \hbar k e^{iky} \phi_k(x).$$

²Dado que $\vec{P} = \vec{\pi} - e\vec{A}$ el Hamiltoniano $H = \frac{\vec{\pi}^2}{2m} = \frac{(m\vec{v})^2}{2m}$ corresponde al Halmitoniano de una partícula libre. Esto se debe a que el campo magnético no realiza trabajo. Sin embargo, en mecánica cuántica se trabaja con variables canónicas.

³Recordemos que x, P son variables canónicas, i.e., cumplen con las relaciones de conmutación $[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$ y $[x_i, x_j] = [P_i, P_j] = 0$.

Entonces, podemos simplemente remplazar el operador $\hat{P}_y$ por su valor propio $P_y = \hbar k$ en (3.8) y reescribir el Hamiltoniano como

$$\begin{aligned}\hat{H}e^{iky}\phi_k(x) &= \frac{1}{2m} \left[-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + (\hbar k + eB_0 x)^2 \right] e^{iky}\phi_k(x) \\ &= \frac{1}{2m} \left[-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + e^2 B_0^2 \left(\frac{\hbar k}{eB_0} + x \right)^2 \right] e^{iky}\phi_k(x) \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2} (\hbar k + x)^2 \right] e^{iky}\phi_k(x),\end{aligned}$$

donde $\omega = eB_0/m$. Este es el primer ejemplo que reducimos a la forma del oscilador armónico cuántico (en el apéndice B se encuentra el método algebraico para resolver el oscilador armónico cuántico), con la diferencia de que está centrado en $x_0 = p_y/eB_0$, lo cual no afecta al espectro de energías. Sabemos que dicho espectro es de la forma

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{con} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.11)$$

La energía sólo depende del número cuántico n y no de k , por lo que es un sistema degenerado. El conjunto de estados para cada nivel de energía representa un nivel de Landau.

3.3. Partícula relativista de espín 0 en un campo magnético

Las partículas relativistas de espín 0 son descritas a través de la ecuación de Klein-Gordon (para más detalles, ver apéndice A). En unidades naturales, la ecuación de Klein-Gordon se escribe

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \nabla^2 + m^2 \right) \Phi = 0.$$

donde $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$. De manera similar al caso no relativista, un campo electromagnético se incorpora en el Hamiltoniano por medio de la sustitución mínima

$$\hat{E} \rightarrow i \frac{\partial^2}{\partial t^2} - eA_0, \quad \hat{P} \rightarrow -i\nabla + e\hat{A}.$$

Usando esta prescripción en la ecuación de Klein-Gordon, tenemos que en la presencia de campo magnético

$$-\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Phi = \left((-i\nabla + e\hat{A})^2 + m^2 \right) \Phi$$

Como hemos venido trabajando, consideramos un campo magnético uniforme en dirección $\hat{z}$ eligiendo el potencial vectorial en la norma de Landau $\hat{A} = (0, B_0\hat{x}, 0)$. Con esta elección, la ecuación de Klein-Gordon en presencia de un campo magnético se escribe

$$-\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Phi = \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(-i\frac{\partial}{\partial y} + eB_0\hat{x} \right)^2 + m^2 \right) \Phi. \quad (3.12)$$

Debido a que en el Halmitoniano no aparece $\hat{y}$, por separación de variables podemos escribir la solución como el producto de una onda plana y una función que solo depende de x :

$$\Phi = Ne^{i(Et + P_y y)}\phi(x). \quad (3.13)$$

Cambiando el operador de momento en la dirección $\hat{y}$ por su eigenvalor, tenemos la ecuación

$$\left(-E^2 + m^2 + (P_y + eB_0x)^2 - \frac{d^2}{dx^2} \right) \phi(x) = 0.$$

Ahora, haciendo el cambio de variable siguiente

$$-\bar{E}^2 = -E^2 + m^2,$$

podemos escribir

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} - (eB_0)^2 \left(\frac{P_y}{eB_0} + x \right)^2 \right) \phi = \bar{E}^2 \phi. \quad (3.14)$$

Aquí, de nuevo, podemos identificar la ecuación de movimiento correspondiente a un oscilador armónico cuántico con masa $m_1 = 1/2$ y frecuencia $\omega = 2eB_0$,

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{4}\omega^2 x^2 \right) \phi = \bar{E}^2 \phi.$$

Por tanto, los eigenvalores para $\bar{E}_n$ son de la forma

$$\bar{E} = \sqrt{2eB_0 \left(n + \frac{1}{2} \right)},$$

y entonces, los eigenvalores para la energía son

$$E = \sqrt{2eB_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) + m^2}. \quad (3.15)$$

Esta relación ha perdido la equidistancia del espectro y la dependencia lineal de la magnitud del campo B_0 presente en el caso no relativista de la Ec. (3.11).

3.4. Niveles de Landau en el grafeno

3.4.1. Grafeno prístino

Como mencionamos en el capítulo 2, los portadores de carga del grafeno en la proximidad de los punto de Dirac, a bajas energías se describen por una ecuación análoga a la ecuación de Dirac de dos dimensiones para fermiones sin masa (ver apéndice A). Por lo anterior tenemos que para la proximidad del punto K , en unidades naturales donde la velocidad de la luz es remplazada por la velocidad de Fermi $c \rightarrow v_F = 1$, tenemos la ecuación

$$(\sigma \cdot \Pi)\Phi = E\Phi. \quad (3.16)$$

Usando las definiciones de las matrices de Pauli (ver apéndice A), explícitamente escribimos

$$\begin{aligned} & \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \hat{\Pi}_x + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \hat{\Pi}_y \right] \begin{pmatrix} \Phi_A \\ \Phi_B \end{pmatrix} = \\ & \begin{pmatrix} 0 & \hat{\Pi}_x - i\hat{\Pi}_y \\ \hat{\Pi}_x + i\hat{\Pi}_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_A \\ \Phi_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Phi_A \\ \Phi_B \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Esta ecuación matricial es equivalente a las siguientes dos ecuaciones escalares

$$\begin{aligned} (\hat{\Pi}_x - i\hat{\Pi}_y)\Phi_B &= E\Phi_A, \\ (\hat{\Pi}_x + i\hat{\Pi}_y)\Phi_A &= E\Phi_B, \end{aligned}$$

que se desacoplan con un simple despeje y sustitución, lo que nos deja

$$\begin{aligned} (\hat{\Pi}_x - i\hat{\Pi}_y)(\hat{\Pi}_x + i\hat{\Pi}_y)\Phi_A &= E^2\Phi_A \\ (\hat{\Pi}_x + i\hat{\Pi}_y)(\hat{\Pi}_x - i\hat{\Pi}_y)\Phi_B &= E^2\Phi_B. \end{aligned}$$

Al desarrollar el producto y siendo cuidadosos en que los operadores en general no conmutan, tenemos que

$$(\hat{\Pi}_x^2 + \hat{\Pi}_y^2 + i[\hat{\Pi}_x, \hat{\Pi}_y])\Phi_A = E^2\Phi_A, \quad (3.18)$$

$$(\hat{\Pi}_x^2 + \hat{\Pi}_y^2 - i[\hat{\Pi}_x, \hat{\Pi}_y])\Phi_B = E^2\Phi_B. \quad (3.19)$$

Como lo hemos estado usando, el efecto de un campo magnético uniforme perpendicular al plano se introduce por medio de la sustitución mínima $\hat{\Pi} = \hat{P} + e\hat{A}$, en la norma de Landau. Calculando explícitamente el conmutador entre los momentos

$$\begin{aligned} [\hat{\Pi}_x, \hat{\Pi}_y] &= [\hat{P}_x, \hat{P}_y + eB_0\hat{x}] = eB_0[\hat{P}_x, \hat{x}], \\ &= -ieB_0, \end{aligned} \quad (3.20)$$

podemos identificar que las ecuaciones (3.18) y (3.19) adquieren la forma de una ecuación de oscilador armónico cuántico de masa $1/2$ y frecuencia $\omega = 2eB_0$, de la manera siguiente

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{(2eB_0)^2}{4} \left(\frac{P_y}{eB_0} + x \right)^2 \right) \Phi_A = (E^2 - eB_0) \Phi_A, \quad (3.21)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{(2eB_0)^2}{4} \left(\frac{P_y}{eB_0} + x \right)^2 \right) \Phi_B = (E^2 + eB_0) \Phi_B, \quad (3.22)$$

lo que nos conduce a un espectro de energía para la ecuación (3.21) de la forma

$$E_{A,n} = \sqrt{2eB_0(n + \frac{1}{2}) + eB_0} = \sqrt{2eB_0(n + 1)}, \quad (3.23)$$

y análogamente, el correspondiente de la ecuación (3.22) adquiere la forma

$$E_{B,n} = \sqrt{2eB_0 n}. \quad (3.24)$$

Este comportamiento ha sido confirmado experimentalmente [17, 23, 31].

3.4.2. Grafeno con estiramiento uniaxial uniforme

La isotropía en los conos de Dirac se pierde cuando el grafeno está sujeto a tensiones. Más aún, la sección transversa de dichos conos deja de ser circular, para volverse elíptica. Finalmente, dichos conos se inclinan y desplazan de su posición original en las esquinas de la zona de Brillouin [32]. Todo esto se entiende físicamente si la velocidad de Fermi deja de ser escalar y adquiere un carácter tensorial. Con esto en mente, el Hamiltoniano (3.4.1) deja de ser correcto. En [32] se propone la siguiente modificación para el momento del Hamiltoniano,

$$\hat{\Pi} = a(x, y) \hat{\Pi}_x + b(x, y) \hat{\Pi}_y, \quad (3.25)$$

donde a y b son funciones adimensionales ⁴. En el caso de una deformación mecánica uniaxial uniforme, en (3.25) las funciones a y b se reemplazan por simples números, de modo que el Hamiltoniano toma la forma

$$\begin{pmatrix} 0 & a\hat{\Pi}_x - ib\hat{\Pi}_y \\ a\hat{\Pi}_x + ib\hat{\Pi}_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_A \\ \Phi_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Phi_A \\ \Phi_B \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Esto es una buena aproximación, pues estudios previos muestran que los conos de Dirac tienen una sección transversal elíptica en el régimen de bajas energías

⁴Para mantener la hermiticidad del Hamiltoniano, formalmente se debe reemplazar $a(x, y) \hat{\Pi}_x \rightarrow \sqrt{a(x, y) \hat{\Pi}_x} \sqrt{a(x, y)}$ y $b(x, y) \hat{\Pi}_y \rightarrow \sqrt{b(x, y) \hat{\Pi}_y} \sqrt{b(x, y)}$ [33].

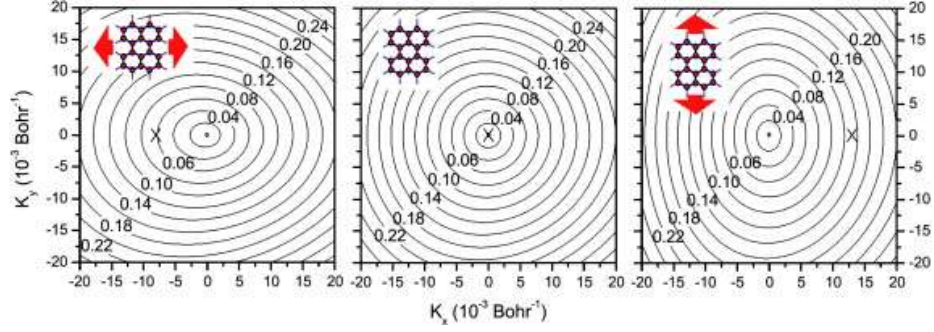


Figura 3.2: Curvas de nivel de los conos de Dirac en el grafeno pristino (centro) y bajo una deformación axial uniforme (izquierda y derecha) del 10 %. Los puntos de Dirac corresponde al centro de cada figura, y los puntos K están representados por un equis. En el grafeno pristino encontramos los puntos de Dirac y los puntos K juntos, mientras que una deformación uniforme en dirección *zig-zag* o *arm chair*, en ambos casos, provoca un desplazamiento. El número indica la energía correspondiente a la curvas de nivel en eV. Figura toma de la Ref. [32]

$|E| < 1\text{eV}$, como se observa en la Figura 3.2, de ahí que a y b son aproximadamente constantes y están relacionados con el semieje mayor y semieje menor de la elipse [32]. Con lo anterior podemos proseguir de manera similar al grafeno no deformado, y entonces al desacoplar el Halmiltoniano (3.26) lo que nos lleva a las siguientes ecuaciones

$$\begin{aligned} (a^2 \hat{\Pi}_x^2 + a^2 \hat{\Pi}_y^2 + iab[\hat{\Pi}_x, \hat{\Pi}_y])\Phi_A &= E^2 \Phi_A, \\ (a^2 \hat{\Pi}_x^2 + a^2 \hat{\Pi}_y^2 - iab[\hat{\Pi}_x, \hat{\Pi}_y])\Phi_B &= E^2 \Phi_B. \end{aligned}$$

Como hemos usado, el campo magnético perpendicular al plano se manifiesta mediante la sustitución mínima, $\hat{\Pi} = \hat{P} + e\hat{A}$. Eligiendo el potencial vectorial en la norma de Landau $\hat{A} = (0, xB_0, 0)$, se llega a las ecuaciones

$$\left(a^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + b^2 (P_y + eB_0 x)^2 \right) \Phi_{A,B} = (E^2 \mp abeB_0) \Phi_{A,B},$$

donde el signo más es para Φ_A y el signo menos para Φ_B . Dividiendo la ecuación anterior por a^2 , se tiene

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{b^2}{a^2} (P_y + eB_0 x)^2 \right) \Phi_{A,B} = \left(E^2 \mp \frac{beB_0}{a} \right) \Phi_{A,B}, \quad (3.27)$$

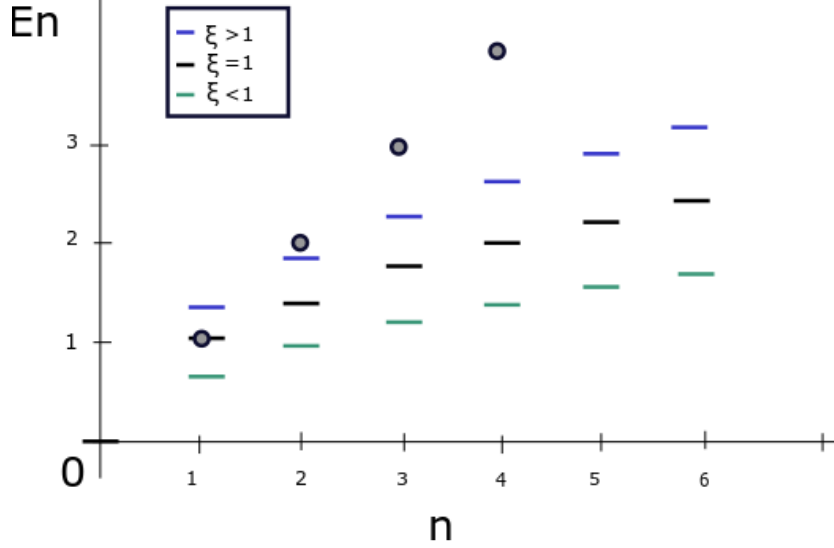


Figura 3.3: Los niveles de Landau de los conductores usuales están representados por los círculos, lo cuales son equidistantes. En el caso del grafeno deja tener esta separación constante, como se observa en el grafeno prístino (rayas negras) y deformado (rayas azules para una expansión, $\xi > 0$, y verde para una contracción $\xi < 0$).

que identificando $w = \frac{2beB_0}{a}$, se puede llevar a la forma de la ecuación del oscilador armónico cuántico de masa $m = 1/2$ como

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{w^2}{4}(P_y + x)^2 \right) \Phi_{A,B} = \left(\frac{E^2}{a^2} \mp \frac{beB_0}{a} \right) \Phi_{A,B}. \quad (3.28)$$

Por lo tanto, las energías son de la forma

$$E_{A,n} = \sqrt{2abeB_0(n+1)} = \sqrt{ab}\sqrt{2eB_0(n+1)}, \quad (3.29)$$

$$E_{B,n} = \sqrt{2abeB_0n} = \sqrt{ab}\sqrt{2eB_0n}. \quad (3.30)$$

Podemos observar que estos valores propios del Hamiltoniano varían por un factor $\xi = \sqrt{ab}$ con respecto a las eigenenergías (3.23) y (3.24) correspondientes al grafeno sin deformar, por lo que podemos introducir el factor como una medida de contracción cuando $\xi < 1$ o una expansión si $\xi > 1$ de la separación de los niveles de Landau (ver Figura 3.3).

3.4.3. Grafeno bajo una deformación no uniforme

En el grafeno, las deformaciones no uniformes producen campos pseudo-magnéticos no homogéneos que suelen ser complicados de caracterizar. Mediciones experimentales han encontrado campos pseudomagnéticos muy intensos de hasta 300 T en nanoborbulas de grafeno [34]. Lo anterior ha estimulado el desarrollo de modelos teóricos para controlar las propiedades electrónicas del grafeno por medio de esfuerzos mecánicos, lo que se conoce como *strain engineering* o *straintronics* en inglés. Para deformaciones no uniformes que varían suavemente en distancias interatómicas, la deformación de la zona de Brillouin es tal que los conos de Dirac localizados en los puntos K y K' son desplazados en direcciones contrarias, lo cual induce un campo de norma que actúa como un campo magnético [35]. Esta deformación rompe con la simetría en las integrales de salto a primeros vecinos t_1, t_2 y t_3 (que supusimos en el cálculo de la estructura de bandas en el Capítulo 2) tengan diferentes valores. Esto resulta en un nuevo Hamiltoniano efectivo cerca de los puntos K de la forma [12]

$$\hat{H} = \sigma \cdot (\hat{P} - \hat{A}), \quad (3.31)$$

donde el operador $\hat{A}$ es similar al vector potencial del campo magnético, pero es ficticio y se le denota en la literatura *campo pseudo-magnético*. Se sabe que actúa sobre el pseudo-espín de los portadores de carga, más que con su espín real, de ahí que antepongamos la etiqueta *pseudo* para referirnos a éste. Una deformación en dos dimensiones u_{ij} nos permite definir el pseudo-potencial vectorial de la forma [35, 36]

$$A = \frac{\beta}{a} \begin{pmatrix} u_{xx} - u_{yy} \\ -2u_x u_y \end{pmatrix}, \quad (3.32)$$

donde a es la constante de red, $\beta = -\partial \ln t / \partial \ln a \approx 2$ y t es la integral de salto entre primeros vecinos. Un modelo para producir un campo pseudo-magnético uniforme se consigue con una deformación a lo largo de las tres direcciones cristalográficas (ver Figura 3.4), induciendo un campo de norma que actúa generando dicho campo pseudo-magnético uniforme superior a los 10 T. Es importante remarcar el hecho de que actúa con signos opuesto en los dos valles K y K' [35].

Realizar el diseño mencionado es aun complicado. En especial, la fuerza tangencial que se debe aplicar en los punto de la circunferencia como se aprecia en la figura 3.4. Inspirado en el modelo anterior, una buena aproximación es tomar una muestra hexagonal de grafeno y estirarlo en los lados no adyacentes. Lo anterior, produce un campo pseudo-magnético bastante uniforme en el centro (ver figura 3.5), como se reporta en los experimentos numéricos realizados en [35].

De aquí en adelante vamos a distinguir a los dos puntos canónicos K y K' con la etiqueta “+” y “-”, respectivamente. De esta manera, podemos escribir simultáneamente el Hamiltoniano completo cerca de los dos valles de Dirac como

$$\hat{H}_s^\xi = v_f [\sigma_1 p_x + \xi \sigma_2 (p_y + ex B_\xi)] \quad (3.33)$$

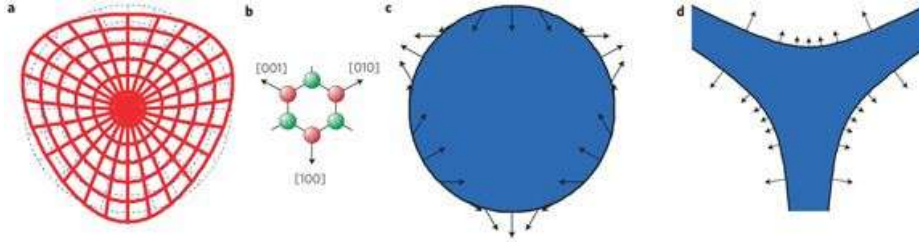


Figura 3.4: Modelo para generar un campo pseudo-magnético uniforme a partir de un disco. *a)* En rojo se muestra la deformación requerida para producir un campo pseudo-magnético uniforme B_s . *b)* Orientación de la red cristalina con respecto al esfuerzo. *c)* Distribución requerida de las fuerzas sobre el perímetro del disco. *d)* Muestra con la cual se puede obtener el campo uniforme B_s mediante fuerzas sólo normales. Figura tomada de Ref. [35].

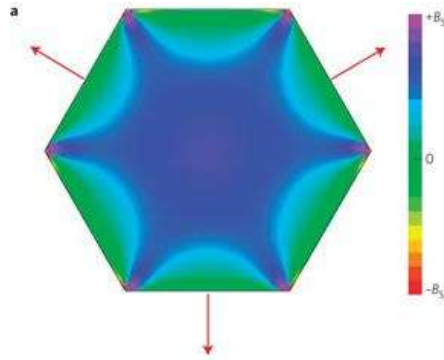


Figura 3.5: Una muestra hexagonal de grafeno de tamaño $1.4 \mu\text{m}$ es estirada por fuerzas que se aplican normalmente a tres lados no adyacentes, creando un campo magnético bastante uniforme en el centro. Figura tomada de Ref. [35]

donde $\xi = \pm 1$, B_ξ representa el campo en el valle K cuando ξ es positivo, o en K' cuando ξ es negativo. De manera más explícita, podemos escribir el Hamiltoniano anterior en forma de la matriz 2×2 siguiente,

$$\hat{H}_s^\xi = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\Pi}_x - i\xi\hat{\Pi}_{y\xi} \\ \hat{\Pi}_x + i\xi\hat{\Pi}_{y\xi} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}, \quad (3.34)$$

y este Hamiltoniano, al igual que los casos anteriores, se diagonaliza de manera directa tomando su cuadrado, lo que nos lleva al sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} (\hat{\Pi}_x^2 + \hat{\Pi}_{y\xi}^2 + i\xi[\hat{\Pi}_x, \hat{\Pi}_{y\xi}])\psi_A &= E^2\psi_A, \\ (\hat{\Pi}_x^2 + \hat{\Pi}_{y\xi}^2 - i\xi[\hat{\Pi}_x, \hat{\Pi}_{y\xi}])\psi_B &= E^2\psi_B. \end{aligned}$$

Como es costumbre en los casos anteriores, tomamos el pseudo-potencial vectorial en la norma de Landau

$$\begin{aligned} (\hat{\Pi}_x^2 + \hat{\Pi}_{y\xi}^2 + \xi e B_\xi)\psi_A &= E^2\psi_A, \\ (\hat{\Pi}_x^2 + \hat{\Pi}_{y\xi}^2 - \xi e B_\xi)\psi_B &= E^2\psi_B. \end{aligned}$$

Como mencionamos anteriormente, es este modelo el campo pseudo-magnético actúa con signo opuesto en los dos diferentes valles. Por lo tanto, los podemos escribir como un campo B_s , de tal forma que $B \rightarrow B_\xi = \xi B_s$. Así, para el valle K , tenemos el Hamiltoniano

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{(2eB_s)^2}{4} \left(x + \frac{P_y}{eB_s} \right)^2 \right) \psi_A = E^2 - eB_s \psi_A \quad (3.35)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{(2eB_s)^2}{4} \left(x + \frac{P_y}{eB_s} \right)^2 \right) \psi_B = E^2 + eB_s \psi_B \quad (3.36)$$

y para el valle K^- aplicamos la transformación

$$\hat{H}^- \rightarrow \sigma_1 H^+ \sigma_1,$$

y adicionalmente un cambio de signo en el campo magnético,

$$B_s \rightarrow -B_s.$$

Así, llegamos al par de ecuaciones

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{(2eB_s)^2}{4} \left(x - \frac{P_y}{eB_s} \right)^2 \right) \psi_A = E^2 - eB_s \psi_A, \quad (3.37)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{(2eB_s)^2}{4} \left(x - \frac{P_y}{eB_s} \right)^2 \right) \psi_B = E^2 + eB_s \psi_B, \quad (3.38)$$

lo que también tiene la forma de oscilador armónico cuántico, pero ahora desplazado por $-P_y/eB_s$. Entonces, para los dos valles tenemos que los niveles de Landau están dados por

$$E_{A,n}^\xi = \sqrt{2eB_s(n+1)}, \quad E_{B,n}^\xi = \sqrt{2eB_s n}. \quad (3.39)$$

Los estados y niveles de Landau que hemos discutido en este capítulo poseen una estructura algebraica elegante y simple que se conoce como mecánica cuántica supersimétrica. En el siguiente capítulo estudiamos este marco teórico para sistemas mecánico cuánticos.

Capítulo 4

Estructura supersimétrica en el grafeno

La supersimetría (SUSY) surgió como un marco teórico para obtener una descripción unificada de todas las interacciones básicas de la naturaleza [37]. Esta simetría extiende el modelo estándar de partículas elementales de tal manera que para cada bosón, se predice la existencia de un supercompañero supersimétrico fermiónico y viceversa. Dado que a la fecha no hay ninguna evidencia de la supuesta simetría, la SUSY, en caso de existir, debe estar rota. En un afán por entender los detalles en los que esta supersimetría pudo romperse, empleando el super-álgebra involucrada en esta teoría, se ha desarrollado la mecánica cuántica supersimétrica [37], la cual encontramos bajo ciertas circunstancias en la física del grafeno. En este Capítulo haremos un breve resumen de mecánica cuántica SUSY y encontraremos el súper-álgebra involucrada en la supersimetría del grafeno .

4.1. Mecánica cuántica supersimétrica

La mecánica cuántica SUSY brinda información del por qué ciertos tipos de potenciales admiten una solución analítica a la ecuación de Schrödinger. También ayuda a encontrar nuevos potenciales solubles y a desarrollar nuevos métodos para encontrar soluciones aproximadas (se pueden revisar para más información en [37]). Como abajo detallaremos, la mecánica cuántica SUSY relaciona el espectro y funciones de onda de dos sistemas mecánico cuánticos cuyos Hamiltonianos contienen potenciales V_1 y V_2 que se relacionan a través de un superpotencial. En unidades naturales $\hbar = c = 1$, vamos a considerar el Hamiltoniano para una partícula de masa $m = 1/2$ que se mueve en una

dimensión bajo la influencia de un potencial $V_1(x)$,

$$H_1 = -\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) \quad (4.1)$$

Para resolver un sistema en la mecánica cuántica, usualmente comenzamos con un potencial V dado y buscamos las funciones de onda que sean funciones propias del Hamiltoniano. Pero también es correcto proceder especificando una función de onda en el estado base, que se anule en el infinito y que no tenga nodos $\psi_0(x)$, y de ésta obtener el potencial que la genera. Sin pérdida de la generalidad, podemos elegir la energía en el estado base como $E_0^{(1)} = 0$, es decir,

$$H_1\psi_0^{(1)} = \left(-\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x)\right)\psi_0^{(1)} = 0$$

y entonces obtener el potencial por

$$V_1 = \frac{\psi_0''}{\psi_0}.$$

Por otro lado, podemos factorizar el Hamiltoniano H_1 como sigue

$$H_1 = A^\dagger(x)A(x), \quad (4.2)$$

donde $A^\dagger(x)$ y $A(x)$ son de la forma

$$A^\dagger(x) = -\frac{d}{dx} + W(x), \quad A(x) = \frac{d}{dx} + W(x). \quad (4.3)$$

Aquí $W(x)$ es conocido como superpotencial, que dadas las relaciones anteriores, Ec. (4.3), nos permite relacionarlo mediante la fórmula de Riccati ¹

$$V_1(x) = W^2(x) - W'(x). \quad (4.4)$$

Observamos que una vez que se cumple $A\psi_1^{(1)} = 0$, automáticamente se tiene la solución $H_1\psi = 0$, con lo cual tenemos a W en términos del estado base con $W = \frac{\psi_0'}{\psi_0}$.

Ahora, relacionamos H_1 con otro Hamiltoniano H_2 que se define como $H_2 = A(x)A^\dagger(x)$. Éste involucra a un nuevo potencial V_2 tal que

$$H_2 = -\frac{d^2}{dx^2} + V_2(x) \quad V_2 = W^2(x) + W'(x). \quad (4.5)$$

¹La ecuación de Riccati tiene la forma $\frac{dy}{dx} + p(x)y + q(x)y^2 + f(x) = 0$ fue desarrollada en el siglo XVIII por el matemático italiano Jacopo Francesco Riccati.

Observemos con detalle el siguiente espectro de energía,

$$H_1\psi_n^{(1)}(x) = A^\dagger(x)A(x)\psi_n^{(1)}(x) = E_n^{(1)}\psi_n^{(1)}(x), \quad (4.6)$$

$$H_2\psi_n^{(2)}(x) = A(x)A^\dagger(x)\psi_n^{(2)}(x) = E_n^{(2)}\psi_n^{(2)}(x). \quad (4.7)$$

Empezamos a notar más relaciones entre estos dos sistemas. Por ejemplo, con lo operadores A y $A^\dagger$ tenemos

$$H_1(A^\dagger\psi_n^{(2)}(x)) = A^\dagger AA^\dagger\psi_n^{(2)}(x) = E_n^{(2)}(A^\dagger\psi_n^{(2)}(x)), \quad (4.8)$$

y análogamente

$$H_2(A\psi_n^{(1)}(x)) = E_n^{(1)}(A\psi_n^{(1)}(x)). \quad (4.9)$$

De la ecuaciones (4.8) y (4.9) y del hecho de que $E_0^{(1)} = 0$, es claro que las eingenfunciones y eingenenergías de H_1 y H_2 están relacionados por:

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= E_{n+1}^{(1)}, E_0^{(1)} = 0, \\ \psi_n^{(2)} &= (E_{n+1}^{(1)})^{-1/2} A\psi_{n+1}^{(1)}, \\ \psi_{n+1}^{(1)} &= (E_n^{(2)})^{-1/2} A^\dagger\psi_n^{(2)}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

Así, A convierte a las eingenfunciones de H_1 en eingenfunciones de H_2 y viceversa con $A^\dagger$, permitiéndonos conectar todo el espectro.

Con el fin de tratar los Halmitonianos de manera simultánea, definimos el Halmitoniano extendido en forma de matriz 2×2

$$H = \begin{pmatrix} H_2 & 0 \\ 0 & H_1 \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

y las supercargas

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & A \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad Q^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A^\dagger & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.12)$$

los cuales cumplen las siguiente relaciones de conmutación y anticonmutación del álgebra supersimétrica:

$$\begin{aligned} \{Q, Q\} &= \{Q^\dagger, Q^\dagger\} = 0, \\ \{Q, Q^\dagger\} &= H, \\ [Q, H] &= [Q^\dagger, H] = 0. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Si tenemos un sistema mecánico cuántico y uno o más operadores Q_i y $Q_i^\dagger$ que verifiquen el álgebra anterior, decimos que tenemos un sistema supersimétrico [37]. Veremos las implicaciones de este álgebra en los estados de Landau en grafeno discutidos previamente.

4.2. Grafeno prístino

Como se ha mencionado en los capítulos anteriores, los portadores de carga en el grafeno prístino tienen un comportamiento análogo a los fermiones de Dirac sin masa pero a una velocidad trescientas veces menor que la de la luz, esto cerca de las esquinas de la zona de Brillouin. Este Halmitoniano efectivo lo diagonalizamos tomando su cuadrado. Cerca del punto K , como vimos anteriormente, tenemos el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} H_A^+ &= (\hat{\Pi}_x^2 + \hat{\Pi}_y^2 + i[\hat{\Pi}_x, \hat{\Pi}_y])\Phi_A = E^2\Phi_A, \\ H_B^+ &= (\hat{\Pi}_x^2 + \hat{\Pi}_y^2 - i[\hat{\Pi}_x, \hat{\Pi}_y])\Phi_B = E^2\Phi_B. \end{aligned}$$

Al igual que en el Capítulo 3, introducimos un campo magnético uniforme en la dirección $\hat{z}$ a través de la sustitución mínima $\hat{\Pi} = \hat{P} + e\hat{A}$, de la cual se desprende la relación de conmutación $[\hat{\Pi}_x, \hat{\Pi}_y] = -ieB$. Eligiendo nuevamente el potencial vectorial, en la norma de Landau $\hat{A} = (0, eB\hat{x}, 0)$ nos conduce al par de ecuaciones

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + (P_y + eBx)^2 + eB\right)\Phi_A = E^2\Phi_A, \quad (4.14)$$

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + (P_y + eBx)^2 - eB\right)\Phi_B = E^2\Phi_B, \quad (4.15)$$

que podemos relacionar, en el espíritu de la mecánica cuántica SUSY, en términos de un superpotencial w

$$H_A^+ = -\frac{d^2}{dx^2} + w^2(x) + w'(x) = A(x)A^\dagger(x), \quad (4.16)$$

$$H_B^+ = -\frac{d^2}{dx^2} + w^2(x) - w'(x) = A^\dagger(x)A(x), \quad (4.17)$$

identificando

$$w = (P_y + eBx), \quad w' = eB. \quad (4.18)$$

A partir de w , los potenciales compañeros supersimétricos se identifican como

$$V_A^+ = w^2 + w' \quad V_B^+ = w^2 - w'(x). \quad (4.19)$$

Así, los operadores que factorizan a los Halmitonianos (4.14) y (4.15) son

$$A(x) = \frac{d}{dx} + (P_y + eBx) \quad A^\dagger(x) = -\frac{d}{dx} + (P_y + eBx) \quad (4.20)$$

de donde podemos definir a las supercargas como

$$Q_+ = \left(\frac{d}{dx} + (P_y + eBx) \right) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.21)$$

$$Q_+^\dagger = \left(-\frac{d}{dx} + (P_y + eBx) \right) \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.22)$$

A partir de ellas, se obtiene el Halmitoniano cerca de K con el anticomutador

$$H^+ = \begin{pmatrix} H_A^+ & 0 \\ 0 & H_B^+ \end{pmatrix} = \{Q_+, Q_+^\dagger\}. \quad (4.23)$$

Para el punto K' , las supercargas correspondientes las podemos obtener conju-
gando las cargas (4.21) y (4.22) por la matriz de Pauli σ_1 , como mostramos a
continuación

$$Q_- = \sigma_1 Q_+ \sigma_1, \quad Q_-^\dagger = \sigma_1 Q_+^\dagger \sigma_1. \quad (4.24)$$

Así, estas cargas cumplen también con el superálgebra expuesto anteriormente

$$H^- = \{Q_-, Q_-^\dagger\}. \quad (4.25)$$

Entonces, tenemos que el grafeno prístino bajo la presencia de un campo magnéti-
co uniforme cerca los dos puntos de Dirac tiene una estructura supersimétrica.
El Halmitonio 4×4 completo que incluye tanto las dos subredes como los dos
puntos K y K' es de la forma

$$\mathbb{H} = \begin{pmatrix} -\frac{d^2}{dx^2} + V_A^+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{d^2}{dx^2} + V_B^+ & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{d^2}{dx^2} + V_A^- & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{d^2}{dx^2} + V_B^- \end{pmatrix}. \quad (4.26)$$

La súpercaras para este Halmitoniano extendido se pueden definir de manera
compacta en bloques de 2×2 como

$$\mathbb{Q} = \begin{pmatrix} Q_+ & 0 \\ 0 & Q_- \end{pmatrix}, \quad \mathbb{Q}^\dagger = \begin{pmatrix} Q_+^\dagger & 0 \\ 0 & Q_-^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

Se sigue que cumplen con el superálgebra

$$\mathbb{H} = \{\mathbb{Q}, \mathbb{Q}^\dagger\}, \quad (4.28)$$

y entonces el Halmitoniano extendido también cuenta con estructura super-
simétrica. Dicha estructura en grafeno es esperada, pues la ecuación de Dirac
es un ejemplo típico de sistemas mecánico cuánticos que poseen una estructura
supersimétrica. La pregunta que nos planteamos en esta tesis es si ésta se
sigue conservando cuando las muestras de grafeno son deformadas. En las si-
guientes secciones estudiaremos si la supersimetría se sigue conservando cuando
el grafeno es sometido a deformaciones mecánicas uniformes y no uniformes.

4.3. Grafeno deformado uniaxial y uniformemente

En el Capitulo 3 vimos que para modelar el grafeno bajo estiramiento, recurrimos a una modelación geométrica dada por

$$\hat{\Pi} = a(x, y)\hat{\Pi}_x + b(x, y)\hat{\Pi}_y.$$

Las funciones a y b las consideramos constantes que están relacionadas a los parámetros las secciones transversales en los conos de Dirac, que adquieren perfiles de elipse bajo la deformación. Esto nos conduce a que cerca de K , las ecuaciones de movimiento son

$$(a^2\hat{\Pi}_x + b^2\hat{\Pi}_y \mp iab[\Pi_x, \Pi_y])\Phi_{A,B} = E^2\Phi_{A,B}.$$

Dividiendo entre a^2 la expresión anterior, llegamos a

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{b^2}{a^2}(P_y + eB_0x)^2 \pm \frac{beB_0}{a}\right)\Phi_{A,B} = \frac{E^2}{a}\Phi_{A,B} \quad (4.29)$$

de donde podemos identificar al superpotencial w y su derivada como

$$w = \frac{b}{a}(P_y + eB_0x), \quad w' = \frac{b}{a}eB_0. \quad (4.30)$$

Los operadores escalera son en este caso

$$A(x) = \frac{d}{dx} + \frac{b}{a}(P_y + eB_0x), \quad A^\dagger(x) = -\frac{d}{dx} - \frac{b}{a}(P_y + eB_0x),$$

y a diferencia del caso anterior, aparece el factor a/b en el segundo término de las supercargas, es decir,

$$Q_+ = \left(\frac{d}{dx} + \frac{b}{a}(P_y + eB_0x)\right) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.31)$$

$$Q_+^\dagger = \left(-\frac{d}{dx} + \frac{b}{a}(P_y + eB_0x)\right) \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.32)$$

Las correspondientes cargas del Halmitoniano en el punto K' , se pueden obtener, de nuevo, por una conjugación con σ_1

$$Q_- = \sigma_1 Q_+ \sigma_1, \quad Q_-^\dagger = \sigma_1 Q_+^\dagger \sigma_1, \quad (4.33)$$

y a partir de ellas, obtenemos los Halmitonianos

$$H_+ = \{Q_+, Q_+^\dagger\}, \quad H_- = \{Q_-, Q_-^\dagger\}.$$

Así, podemos volver a definir a las supercargas $\mathbb{Q}_s$ y $\mathbb{Q}_s^\dagger$ de la forma

$$\mathbb{Q} = \begin{pmatrix} Q_+ & 0 \\ 0 & Q_- \end{pmatrix}, \quad \mathbb{Q}^\dagger = \begin{pmatrix} Q_+^\dagger & 0 \\ 0 & Q_-^\dagger \end{pmatrix},$$

lo que nos conduce al Halmitoniano completo para el sistema

$$\mathbb{H} = \{\mathbb{Q}, \mathbb{Q}^\dagger\}. \quad (4.34)$$

Entonces, en este caso de deformación, observamos que persiste la estructura supersimétrica del grafeno.

4.4. Grafeno bajo deformación no uniforme

También en el Capítulo 3, vimos que una deformación no uniforme produce un campo pseudo-magnético que actúa con signo opuesto en las esquinas de la zona de Brillouin K y K' . Introduciendo la siguiente notación para diferenciarlo en los dos puntos de Dirac por $B_\xi = \xi B_s$, para el valle K tenemos que

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + (P_y + eB_+x)^2 \pm eB_s \right) \Phi_{A,B} = E^2 \Phi_{A,B}, \quad (4.35)$$

donde el signo positivo corresponde a Φ_A , y el negativo a Φ_B . Del Halmitoniano anterior podemos identificar los superpotenciales

$$w = (P_y + eB_+x) = (P_y + eB_sx), \quad w' = eB_s, \quad (4.36)$$

y las supercargas correspondientes

$$Q_+ = \left(\frac{d}{dx} + (P_y + eB_sx) \right) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.37)$$

$$Q_+^\dagger = \left(-\frac{d}{dx} + (P_y + eB_sx) \right) \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.38)$$

Para el punto K' , tenemos el Halmitoniano H_s^-

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + (P_y + eB_-x)^2 \mp eB_- \right) \Phi_{A,B} = E^2 \Phi_{A,B}, \quad (4.39)$$

del cual podemos identificar el superpotencial

$$w = (P_y + eB_-) = (P_y - eB_sx), \quad w' = -eB_s \quad (4.40)$$

y entonces, tenemos que en el grafeno bajo una deformación no uniforme, además de la rotación por $H^- = \sigma_x H^+ \sigma$, presente en los casos anteriores se requiere un

cambio en el campo $B \rightarrow B_- = -B_s$. De esta manera las supercargas del punto K' son de la forma

$$Q_- = \left(\frac{d}{dx} + (P_y + eB_-x) \right) \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$Q_-^\dagger = \left(-\frac{d}{dx} + (P_y + eB_-x) \right) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Se tiene también la estructura algebraica supersimétrica en en este sistema, solo que a diferencia de los anteriores el campo magnético es diferente en dos puntos canónicos, y con esto el superpotencial es diferente en cada valle de Dirac. Esto concluye nuestra investigación, en el siguiente Capítulo presentamos las conclusiones.

Capítulo 5

Conclusiones

En esta tesis exploramos los estados de Landau de los electrones del grafeno inmersos en campos magnéticos uniformes. Comenzamos explorando las características del elemento químico constitutivo de este material, el carbono, que junto a su particular arreglo en forma de panal de abejas, nos permitió comprender algunas de sus características de este material y otros que comparten con grafeno su estructura cristalina. La más destacada para los fines de este trabajo es que a bajas energías, los portadores de carga, que llamamos genéricamente electrones, exhiben una relación de dispersión tal que las bandas de conducción y de valencia se tocan en puntos de alta simetría en las esquinas de la zona de Brillouin, los llamados puntos de Dirac. Alrededor de ellos, el Hamiltoniano efectivo corresponde a uno de partículas ultrarelativistas, es decir, toma la forma de un Hamiltoniano de Dirac no masivo donde la velocidad de la luz c de la física de altas energías es reemplazada por la velocidad de Fermi v_F del material. En este sentido, visualizamos al grafeno como un laboratorio matemáticamente sencillo, que ha acaparado intensa investigación en varias ramas de la física.

En especial nosotros nos enfocamos en la física de grafeno para abordar y consolidar algunos aspectos de la mecánica cuántica relativista. En el caso de grafeno, la estructura pseudo-relativista surge en las ecuaciones de movimiento debido a la presencia de las dos subredes triangulares con las que se describe la estructura cristalina del material. No es que la dinámica del material sea invariante bajo transformaciones de Lorentz, pues la velocidad de Fermi en grafeno es unas 300 veces más pequeña que la velocidad de la luz en el vacío. Sin embargo, desde el punto de vista matemático, la identificación de las velocidades $c \leftrightarrow v_F$ nos permite usar las técnicas y resultados desarrollados en la mecánica cuántica relativista para entender aspectos de la física del grafeno.

Centramos nuestro estudio en el comportamiento de los electrones en presencia de campos magnéticos uniformes, es decir, el célebre problema de Landau que describe el comportamiento de los electrones en los semiconductores usuales.

Es bien sabido que la ecuación de Schrödinger en este caso se reduce a una de tipo oscilador armónico cuántico unidimensional donde la frecuencia del oscilador es proporcional al producto de la carga y la intensidad de campo magnético eB . Entonces, los niveles de energía (niveles de Landau) son equidistantes y con separación proporcional a eB . En el caso del grafeno, encontramos que la cuatización de Landau arroja un espectro donde los niveles de energía están separados por $\sqrt{eB}$. Dicho comportamiento es el que corresponde a fermiones de Dirac relativistas.

Con el ánimo de explotar las propiedades del grafeno para fines tecnológicos, ha emergido una línea de investigación teórica y experimental que relaciona las propiedades elásticas del grafeno y sus propiedades electrónicas. Dicha área recibe el nombre de *straintronics* en inglés y tiene por objetivo primordial el controlar sus propiedades de conducción mediante deformaciones mecánicas. En esta tesis nosotros estudiamos modelos donde el grafeno es sometido a deformaciones uniaxiales uniformes. Las observaciones experimentales y resultados teóricos de estas consideraciones son que la velocidad de Fermi se vuelve anisotrópica, lo que provoca cambio en su estructura de bandas; los puntos de Dirac se desplazan de sus posiciones sin deformaciones y la sección transversa de los conos resultantes se vuelve elíptica. Cuando a la dinámica agregamos la influencia de un campo magnético uniforme externo, observamos que los niveles de Landau mantienen su misma estructura relativista, pero el campo magnético que los define se reescala como $eB \rightarrow \sqrt{ab}\sqrt{eB}$, donde a y b son las escalas de estiramiento de la red y que por tanto inducen una contracción o expansión de los niveles de Landau correspondientes.

En el caso cuando el grafeno es sometido a deformaciones no uniformes, una manera natural de incluir su efecto en la ecuación de Dirac es introducir las componentes del tensor de deformaciones mediante un campo auxiliar de norma a través de un acoplamiento mínimo. Entonces, se observa que estas deformaciones producen campos pseudomagnéticos ficticios, pero cuyo efecto se estudia de la estructura de los niveles de Landau. Cabe destacar que en este caso, el campo pseudomagnético actúa de manera distinta en cada punto de Dirac. Esto es importante pues en el caso en el que asumimos que el campo pseudomagnético es uniforme, el espectro para los electrones, si bien sigue manteniendo el carácter relativista del caso de las deformaciones uniformes, es distinto en los dos puntos de Dirac K y K' .

Dada la similitud de los estados de Landau y sus correspondientes espectros, nuestro objetivo principal en este trabajo de tesis ha sido estudiar dicha estructura con la herramienta de la mecánica cuántica supersimétrica. En este marco teórico se estudian pares de sistemas cuánticos sujetos a potenciales distintos que son isoespectrales, es decir, poseen el mismo espectro hasta un estado base adicional que uno de los sistemas posee. La descripción de estos sistemas se da de manera unificada, es decir, a través de un Hamiltoniano efectivo si dicho Hamil-

toniano se obtiene del anticonmutador de dos operadores, llamados supercargas, que además son cantidades conservadas. Para el caso del grafeno prístino, alrededor del punto K los estados poseen una estructura supersimétrica interna. Lo mismo sucede alrededor del punto K' , de modo que la extensión se puede dar a bloques. Sin embargo, en este caso aparece la adicional característica de que las supercargas del punto K están relacionadas con las del punto K' por una transformación que relaciona a estos puntos. Entonces, el espectro de los estados de Landau para el grafeno ideal posee una estructura supersimétrica con los espectros en torno a los puntos K y K' están relacionados. Lo mismo sucede en el caso de grafeno con deformaciones uniformes. Los supercargas alrededor de cada punto están relacionadas por una transformación entre K y K' . En el caso de transformaciones no uniformes, si bien las supercargas alrededor de cada punto de Dirac se pueden encontrar directamente, no existe una relación entre ellas. Para describir una o la otra, es necesario reparametrizar el campo pseudomagnético involucrado en cada caso.

Para el futuro se podría intentar encontrar la estructura supersimétrica de los estados de Landau en el grafeno eligiendo el potencial vectorial con una diferente norma a la de Landau, como podría ser la norma simétrica ($\vec{A} = (-yB_0/2, xB_0/2)$), esta desde luego, debería que mantener su estructura algebraica supersimétrica, donde las supercargas se verían diferente.

Apéndice A

Mecánica cuántica relativista

La ecuación de Schrödinger, que rige la mecánica cuántica, no es invariante bajo transformadas de Lorentz. En este apéndice, describimos las ecuaciones de Klein-Gordon y Dirac, las cuales son consistentes con los postulados de la Relatividad Especial y la Mecánica Cuántica.

A.1. Ecuación de Klein-Gordon

En la mecánica cuántica no relativista, la dinámica de las partículas que se mueven en una región del espacio bajo la influencia de un potencial es regida por la ecuación de Schrödinger. Ésta se deriva a partir del Halmitoniano clásico. En el caso de un sistema conservativo, el Halmitoniano coincide con la energía mecánica del sistema, es decir

$$H = E = \frac{P^2}{2m} + V(x).$$

Al proceder con la (primera) cuantización, debemos de asignar a las variables físicas observables los operador de la mecánica cuántica correspondientes. En la representación o base de estados de posición, asignamos

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad P \rightarrow -i\hbar \nabla, \quad \hat{x} \rightarrow x,$$

que al sustituir en el Halmitoniano y hacerlo actuar sobre una función de onda $\psi(x, t)$, nos conduce a la famosa ecuación de Schrodinger:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi(x, t). \quad (\text{A.1})$$

Tomando el complejo conjugado de la ecuación anterior se tiene

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi^*(x, t), \quad (\text{A.2})$$

multiplicando la ecuación (A.1) por $\psi^*(x, t)$ y la ecuación (A.2) por ψ , y, posteriormente, restándolas, obtenemos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\psi^* \psi] = \frac{-\hbar^2}{2m} [\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*]$$

esta ecuación la podemos identificar como una ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot J = 0 \quad (\text{A.3})$$

donde ρ es definida positiva, y de ahí, la podemos interpretar como la densidad de probabilidad y J es como la densidad de corriente, definidas a continuación

$$\rho = |\psi|^2 = \psi^* \psi, \quad J = \frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*). \quad (\text{A.4})$$

Con todo lo anterior en mente, la ecuación (A.3) se identifica como la conservación de la probabilidad.

La ecuación de Schrödinger tiene derivada parcial de primer orden en el tiempo y de segundo orden en las derivadas espaciales. Esta diferencia del orden entre las derivadas temporales y espaciales causa que la ecuación de Schrödinger no sea invariante de Lorentz; para construir una ecuación de onda relativista, se debe tratar en el mismo nivel las coordenadas espaciales y temporales.

Partiendo de la relación relativista de energía para una partícula libre,

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (\text{A.5})$$

sustituyendo los operadores correspondientes de la mecánica cuántica y actuando sobre una función de onda $\psi(x, t)$, se tiene la ecuación de Klein-Gordon

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(x, t) = (-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4) \psi(x, t).$$

Utilizando la notación para los cuadri-vectores de posición en forma contravariante y covariante:

$$\begin{aligned} x^\mu &= (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x, y, z), \\ x_\mu &= (x_0, -x_1, -x_2, -x_3) = (ct, -x, -y, -z), \end{aligned}$$

y

$$\partial^\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu}, \quad \partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}, \quad (\text{A.6})$$

la ecuación de Klein-Gordon se puede escribir como

$$\left(\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \psi = 0. \quad (\text{A.7})$$

En la literatura, se suele encontrar el uso del operador D'lambertiano $\square^2 = \partial_\mu \partial^\mu$ [38], con el podemos escribir la ecuación de Klein-Gordon de la forma siguiente

$$\left(\square^2 + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \psi = 0. \quad (\text{A.8})$$

Multiplicando la ecuación (A.7) por ψ^*

$$\psi^* \left(\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \psi = 0$$

y restando su complejo conjugado a la ecuación anterior se tiene

$$\psi^* \partial_\mu \partial^\mu \psi - \psi \partial_\mu \partial^\mu \psi^* = 0, \quad (\text{A.9})$$

o bien,

$$\partial_\mu (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*) = 0.$$

Multiplicando ahora por $\frac{\hbar}{2mc^2}$, esta relación se puede expresar como

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\hbar}{2mc^2} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right) \right) + \nabla \cdot \frac{\hbar}{2mc^2} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = 0,$$

que podemos identificar como una ecuación de continuidad,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot j = 0,$$

donde la densidad de corriente se identifica con

$$j = \frac{\hbar}{2mc^2} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = 0$$

y densidad

$$\rho = \frac{\hbar}{2mc^2} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right),$$

que no es definida positiva, por lo que no se puede interpretar como la densidad de probabilidad. Esto la hace incompatible con la interpretación estadística de Born, que dice que $|\Psi|^2$ es la probabilidad de encontrar la partícula en un punto del espacio.

La ecuación de Klein-Gordon tiene la forma de una ecuación de onda clásica, por lo que las soluciones son de la forma

$$\psi = \exp(Et - P \cdot x)/\hbar, \quad (\text{A.10})$$

que describen partículas libres con energía

$$E = \pm \sqrt{m^2 c^4 + c^2 P^2},$$

que tiene soluciones con energía positiva y negativa. Con las primeras, sabemos cómo proceder, pero las soluciones de energía negativa son difíciles de interpretar físicamente. Para solucionar este problema, debemos invocar a la idea de antipartículas.

A.1.1. Matrices de Pauli

Las matrices de Pauli forman una base vectorial del álgebra de Lie, del grupo especial unitario SU(2). La representación de las matrices de Pauli que usamos en esta tesis es:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.11})$$

Las matrices de Pauli cumplen con la siguientes relaciones

$$\sigma_i^2 = 1, \quad \sigma_i \sigma_j = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k, \quad \{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}I$$

donde ϵ es el símbolo de Levi-Civita. Además, estas matrices son Hermitianas y son usadas en la mecánica cuántica para descubrir el álgebra del spin.

A.2. Ecuación de Dirac

Dirac busco una ecuación diferencial de primer orden en el tiempo que fuera consistente con la relación relativista de energía-momento.

A.2.1. Ecuación de Dirac en (3+1) dimensiones

Dirac propuso un Hamiltoniano de la forma

$$H\Psi = i\frac{\partial}{\partial t}\Psi = (\vec{\alpha} \cdot \vec{P} + \beta m)\Psi, \quad (\text{A.12})$$

donde los coeficientes de α no pueden ser números, pues implicaría que existe una dirección preferencial, lo que no sería invariante bajo rotaciones. Esto está

en contradicción con los postulados de la relatividad especial. Considerando el cuadrado del Hamiltoniano anterior,

$$\begin{aligned}
 -\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j}^3 (\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i) \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^i \partial x^j} \\
 &\quad - im \sum_{i=1}^3 (\alpha_i \beta + \beta \alpha^i) \frac{\partial \phi}{\partial x_i} + \beta^2 m^2 \phi.
 \end{aligned} \tag{A.13}$$

Ya que esta expresión debe ser consistente con la relación relativista de energía-momento, tenemos que $\vec{\alpha}$ y β son matrices y deben satisfacer las siguientes condiciones:

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij}, \tag{A.14}$$

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0, \tag{A.15}$$

$$\alpha_i^2 = \beta^2 = 1. \tag{A.16}$$

La hermeticidad de Hamiltoniano implica de α y β también lo son, lo que se refleja en (A.16), que implica que sus eigenvalores sean ∓ 1 . Esto junto con la relación (A.16) implica que

$$\alpha_i = -\beta \alpha_i \beta.$$

Tomando traza en ambos lados de esta expresión,

$$Tr(\alpha_i) = Tr(-\beta \alpha_i \beta) = -Tr(\beta \alpha_i \beta) = -Tr(\beta^2 \alpha_i) = -Tr(\alpha_i) = 0. \tag{A.17}$$

Esto conduce a que el número de eigenvalores positivos debe ser igual al de los negativos, obligando a que la dimensión de las matrices sea par. La menor dimensión es dos, pero dado que existen 3 matrices que anticonmutan, conocidas como las matrices de Pauli, la menor dimensión de las matrices es 4. Sin embargo, las matrices Pauli, como veremos en la siguiente sección, son suficientes para describir a las partículas confinadas al plano.

Las matrices 4×4 están dadas en términos de las matrices de Pauli como sigue

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{A.18}$$

Con estas matrices podemos resolver la ecuación de Schrödinger usando el Hamiltoniano de Dirac,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H \Psi. \tag{A.19}$$

Las funciones de onda sobre las que actúa el Hamiltoniano de Dirac Ψ son un vector columna de 4×1

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.20})$$

Entonces, para construir la ecuación de conservación de corriente se multiplica por la izquierda la ecuación (A.12) por $\Psi^\dagger$

$$i\Psi^\dagger \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\Psi^\dagger \frac{\partial \Psi}{\partial x^j} \alpha_j \Psi + m\Psi^\dagger \beta \Psi. \quad (\text{A.21})$$

Considerando ahora la ecuación hermitica conjugada de la ecuación (A.12), al multiplicarla por la derecha por Ψ , se obtiene

$$-i \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial t} \Psi = i \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial x^j} \alpha_j \Psi + m\Psi^\dagger \beta \Psi. \quad (\text{A.22})$$

Restando la ecuación (A.22) a (A.21), tenemos

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \Psi^\dagger \Psi}{\partial t} &= -i \frac{\partial}{\partial x^j} \Psi^\dagger \alpha_j \Psi, \\ \rho &= \Psi^\dagger \Psi = (\Psi_1^*, \Psi_2^*, \Psi_3^*, \Psi_4^*) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

En esta ecuación, ρ es positivo definido, así que la ecuación de Dirac es compatible con la interpretación probabilística de Bohr.

Los estados de las partículas descritas por la ecuación de Dirac son representados por los 4-espinores, que escribimos de la forma

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix}$$

en términos de los 2-espinores

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}, \quad \chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.24})$$

Para aclarar un poco esta separación de las componentes de la función de onda, vamos a escribir la ecuación Dirac (A.12) como matriz

$$H\Psi = \begin{pmatrix} m & \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \\ \vec{p} \cdot \vec{\sigma} & -m \end{pmatrix} \Psi \quad (\text{A.25})$$

y consideramos el caso de una partícula en reposo, $\vec{P} = 0$, es decir

$$\begin{pmatrix} m & 0 \\ 0 & -m \end{pmatrix} \Psi = E\Psi. \quad (\text{A.26})$$

Entonces, las componentes del 2-espinor ϕ corresponden a energías positivas, mientras que a las componentes de χ a energías negativas,

$$E\phi = m\phi, \quad E\chi = -m\chi. \quad (\text{A.27})$$

De esta interpretación se llegó a la predicción de la existencia de la antimateria.

Otra consecuencia de la ecuación de Dirac es el surgimiento de manera natural del spin. Así, ϕ_1 y ϕ_2 representan las dos posibles orientaciones del spin en fermiones de $1/2$ y los mismo para las componentes de χ , pero para las antipartículas.

Es usual encontrar a la ecuación de Dirac en su forma covariante, en términos de las matrices de Dirac, que se definen como:

$$\gamma = (\beta, \beta\alpha). \quad (\text{A.28})$$

Multiplicando la ecuación (A.12) por la izquierda por β , tenemos que

$$\begin{aligned} (\gamma^\mu p_\mu - m)\Psi &= 0, \\ (i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\Psi &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

se sigue que estas matrices satisfacen el álgebra de Clifford

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}.$$

En la siguiente sección trataremos el caso bidimensional que encontramos en los portadores de carga en el grafeno.

A.2.2. Ecuación de Dirac en (2+1) dimensiones

Al eliminar la tercera componente espacial, nos bastan tres matrices de Dirac para describir la ecuación de movimiento, por lo que podemos utilizar matrices de dimensión 2×2 para satisfacer las condiciones (A.14)-(A.16). Podemos escoger estas matrices en términos de las matrices de Pauli, en cualquiera de las siguientes dos formas (no equivalentes):

$$\gamma^0 = \sigma_3, \quad \gamma^1 = i\sigma_1, \quad \gamma^2 = i\sigma_2, \quad (\text{A.30})$$

$$\gamma^0 = \sigma_3, \quad \gamma^1 = i\sigma_1, \quad \gamma^2 = -i\sigma_2. \quad (\text{A.31})$$

Para partículas sin masa se tiene que la ecuación de Dirac estacionaria toma la forma

$$(P \cdot \sigma)\Psi = E\Psi. \quad (\text{A.32})$$

Aquí cabe recordar que esta ecuación esta escrita en unidades naturales, $\hbar = c = 1$, en el caso de los portadores de carga del grafeno tenemos un comportamiento análogo donde la velocidad de Fermi V_f juega el papel de la velocidad de la luz.

Apéndice B

Oscilador armónico cuántico

El oscilador armónico es de los sistemas físicos más importantes que existen, pues cualquier potencial con un mínimo local se puede aproximar satisfactoriamente por un potencial armónico cerca de dicho mínimo. Lo anterior se puede apreciar si el potencial admite expansión en series de Taylor,

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots$$

y como es alrededor de un mínimo, $V'(x_0) = 0$. Además, podemos restar $V(x_0)$ por ser un constante, debido a que no cambia la fuerza

$$V(x) \approx \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2. \quad (\text{B.1})$$

Otra cuestión, tal vez más importante, es que el oscilador armónico cuántico cuenta con solución analítica.

B.1. Unidades naturales

Las unidades naturales se obtienen haciendo que las cinco constantes universales tomen el valor de la unidad adimensional. Estas son la constante de la velocidad de la luz en el vacío, la constante de gravitación universal, la constante reducida de Planck, la constante de fuerza de Coulomb y la constante de Boltzmann. Trabajar en estas unidades trae consigo la ventaja de que las ecuaciones de la física se vuelven más sencillas. Sin embargo, en algunas ocasiones complica el análisis dimensional. Estas unidades se usan en esta tesis cuando es conveniente. Cabe señalar que cuando tratemos la física del grafeno, la velocidad de Fermi v_F juega el papel de la constante de la velocidad de la luz c .

B.2. Solución algebraica del oscilador armónico cuántico

El Halmitoniano clásico de un oscilador armónico simple tiene la forma

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega x^2. \quad (\text{B.2})$$

Al cuantizar este sistema, promovemos las variables dinámicas a operadores, pues en lugar de paréntesis de Poisson tenemos conmutadores,

$$\{x, P\} \rightarrow -i\hbar[\hat{x}, \hat{P}].$$

Existen dos formas de proceder para resolver el oscilador armónico cuántico. Una manera es por *fuerza bruta* o más educadamente, proponiendo una solución en series de potencias para la ecuación de Schrödinger. La otra, que expondremos a continuación, es utilizar los poderosos operadores escalera, lo cuales se pueden definir como

$$a = \frac{1}{\sqrt{2m}} (\hat{P} + im\omega\hat{x}) \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m}} (\hat{P} - im\omega\hat{x}). \quad (\text{B.3})$$

Estos tienen la intención de factorizar el Halmitoniano (B.2). Del producto de ellos tenemos

$$\begin{aligned} (a^\dagger a)f(x) &= \frac{1}{2m} (\hat{P}^2 - im\omega\hat{x}) (\hat{P} + im\omega\hat{x}) f(x), \\ &= \frac{1}{2m} (\hat{P}^2 + (m\omega\hat{x})^2 - i\hat{x}\hat{P} + i\hat{P}\hat{x}) f(x) \\ &= \frac{1}{2m} (\hat{P}^2 - mi\omega[x, \hat{P}] + (m\omega\hat{x})^2) f(x) \\ &= \frac{1}{2m} (\hat{P}^2 + (m\omega\hat{x})^2 + m\omega) f(x), \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

donde hemos usado la relación de conmutación $[\hat{x}, \hat{P}] = i$. Con el resultado anterior, podemos escribir el Halmitoniano (B.2)

$$\hat{H} = a^\dagger a - \omega \frac{1}{2} = \omega \left(\hat{N} - \frac{1}{2} \right). \quad (\text{B.5})$$

De manera análoga, tomando el producto en orden inverso de los operadores, llegamos a que

$$\hat{H} = aa^\dagger + \omega \frac{1}{2}, \quad (\text{B.6})$$

y entonces se cumple que $[a^\dagger, a] = \omega$.

Un teorema necesario para la solución es que si ψ satisface la ecuación de Schrödinger, con energía E , entonces $a\psi$ satisface la ecuación de Schrödinger con energía $(E + \omega)$, como demostramos a continuación:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= (aa^\dagger + \frac{1}{2}\omega)a\psi = (aa^\dagger a + \frac{1}{2}\omega a)\psi \\ &= a(a^\dagger a + \frac{1}{2}\omega)\psi = a[(a^\dagger a - \frac{1}{2}\omega) + \omega]\psi \\ &= a(E + \omega)\psi = (E + \omega)a\psi.\end{aligned}$$

De la misma manera se demuestra que $a^\dagger\psi$ es solución a la ecuación de Schrödinger, pero con energía $E - \omega$. Así, podemos construir todas las soluciones a partir de una. Dado que existe el estado base Ψ_0 , este se debe anular al aplicar $a^\dagger$ y entonces también se cumple $aa^\dagger\psi_0 = 0$. Por esto, se debe cumplir la siguiente ecuación

$$\frac{1}{2} \left(\frac{d}{dx}\psi_0 - im\omega x\psi_0 \right) \rightarrow \frac{d\psi}{dx} = -m\omega x\psi_0.$$

Esta ecuación diferencial tiene la solución

$$\psi_0 = A_0 \exp\left(\frac{m\omega}{2}x^2\right).$$

Escribiendo la ecuación de Schrödinger con (B.6), se aprecia fácilmente que el estado base tiene energía

$$E_0 = \frac{1}{2}\omega. \quad (\text{B.7})$$

Con lo anteriormente expuesto, tenemos que las funciones de onda y energías son de la forma

$$\psi_n = A_n(a)^n \exp\left(-\frac{m\omega}{2}x^2\right), \quad E_n = \omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (\text{B.8})$$

Además, se puede demostrar que las constantes de normalización son de la forma

$$A_n = \left(\frac{m\omega}{2}\pi\right)^{1/4} \left(\frac{(-i)^n}{(\sqrt{n!}\omega^n)}\right), \quad (\text{B.9})$$

y que la solución explícita a la ecuación de Schrödinger se puede expresar en términos de los polinomios de Hermite como

$$\psi_n(x) = \left(\frac{eB_0}{2\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-1/2\xi^2}, \quad (\text{B.10})$$

donde $\xi = \sqrt{\frac{eB_0}{2\hbar}}x$, que es la obtuvimos para describir el comportamiento de los portadores de carga del grafeno, a bajas energías, cerca de la proximidad de los puntos de Dirac.

Bibliografía

- [1] J.-N. Fuchs and M. O. Goerbing. *Introduction to the Physical Properties of Graphene*. Lectures Notes, 2008.
- [2] L. Pauling. The nature of the chemical bond. *Journal of the American Chemical Society*, 1931.
- [3] S. Iijima. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature volume 354*, 1991.
- [4] H. W. Kroto, J. R. Heath, R. F. Curl S. C. O'Brien, and R. E. Smalley. C60: Buckminsterfullerene. *Nature volume 318*, 1985.
- [5] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 2004.
- [6] L.D. Landau and E.M. Lifshitz. *Statistical Physics*. Pergamon, Oxford, 1980.
- [7] N. D. Mermin. Crystalline order in two dimensions. *Phys. Rev.*, 1968.
- [8] A. Fasolino, J. H. Los, and M. I. Katsnelson. Intrinsic ripples in graphene. *Nature Materials volume 6*, 2007.
- [9] K. S. Novoselov and A. K. Geim. The rise of graphene. *Nature Materials*, 2007.
- [10] C. Kittel. *Introduction to solid state physics*. Wiley, 7th ed edition, 1996.
- [11] P. R. Wallace. The band theory of graphite. *Phys. Rev.*, 1947.
- [12] M. I. Katsnelson. *Graphene Carbon in Two Dimensions*. Cambridge University Press, 1 edition, 2012.
- [13] Página web. <http://www.wisphysics.es/2010/10/la-fisica-del-grafenouctura>.

-
- [14] A. Bostwick, T. Ohta, T. Seyller, K. Horn, and E Rotenberg. Quasiparticle dynamics in graphene. *Nature Physics* 3, 2007.
 - [15] D. W. Boukhvalov, M. I. Katsnelson, and A. I. Lichtenstein. Hydrogen on graphene: Electronic structure, total energy, structural distortions and magnetism from first-principles calculations. *Phys. Rev. B*, 2008.
 - [16] A.A. Balandin, S. Ghosh, and W. Bao. Superior thermal conductivity of single-layer graphene. *Nano Lett.* 8, 2008.
 - [17] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature volume* 438, 2005.
 - [18] N. Savage. Materials science: Super carbon. *Nature volume* 483, 2012.
 - [19] K. S. Kim, Y. Zhao, H. Jang, S. Y. Lee, J. M. Kim, K. S. Kim, J.-H. Ahn, P. Kim, J.-Y. Choi, and B. H. Hong. Large-scale pattern growth of graphene films for stretchable transparent electrodes. *Nature volume* 457, 2009.
 - [20] J. Scott Bunch, Scott S. Verbridge, Jonathan S. Alden, Arend M. van der Zande, Jeevak M. Parpia, Harold G. Craighead, and Paul L. McEuen. Impermeable atomic membranes from graphene sheets. *Nano Lett.*, 2008.
 - [21] K. F. Mak, M. Y. Sfeir, Y. Wu, C. H. Lui, J. A. Misewich, and T. F. Heinz. Measurement of the optical conductivity of graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 2008.
 - [22] R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres, and A. K. Geim. Fine structure constant defines visual transparency of graphene. *Science* 320, 1308, 2008.
 - [23] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim. Experimental observation of the quantum Hall effect and berry's phase in graphene. *Nature volume* 438, 2005.
 - [24] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene. *Nature Physics volume* 2, 2006.
 - [25] C. W. J. Beenakker. Colloquium: Andreev reflection and Klein tunneling in graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 2008.
 - [26] S. Hernández Ortiz. Sobre la transición semimetal-aislante en grafeno, 2013.
 - [27] D. Allor, T. D. Cohen, and D. A. McGady. Schwinger mechanism and graphene. *Phys. Rev. D*, 78:096009, Nov 2008.

-
- [28] P. Castro-Villarreal and R. Ruiz-S. Pseudomagnetic field in curved graphene. *Phys. Rev. B*, 95:125432, Mar 2017.
- [29] D. J. Griffiths. *Introduction to Electrodynamics*. Prentice Hall, 3rd ed edition, 1999.
- [30] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe. *Quantum Mechanics: volumen 2*. WILEY-VCH, 1 edition, 1991.
- [31] G. Li and E. Y. Andrei. Observation of Landau levels of Dirac fermions in graphite. *Nature Physics volume 3*, 2007.
- [32] Y. Betancur-Ocampo, M.E. Cifuentes-Quintal, G. Cordourier-Maruri, and R. de Coss. Landau levels in uniaxially strained graphene: A geometrical approach. *Annals of Physics*, 2008.
- [33] N. M. R. Peres. Scattering in one-dimensional heterostructures described by the dirac equation. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(9):095501, 2009.
- [34] N. Levy, S. A. Burke, K. L. Meaker, M. Panlasigui, A. Zettl, F. Guinea, A. H. Castro Neto, and M. F. Crommie. Strain-induced pseudo magnetic fields greater than 300 tesla in graphene nanobubbles. *Science*, 2010.
- [35] F. Guinea, M. I. Katsnelson, and A. K. Geim. Energy gaps and a zero-field quantum Hall effect in graphene by strain engineering. *Nature Physics volume 6*, 2010.
- [36] J. L. Mañes. Symmetry-based approach to electron-phonon interactions in graphene. *Phys. Rev. B*, 2007.
- [37] F. Cooper, A. Khare, and U. Sukhatme. *Supersymmetry in quantum mechanics*. World Scientific, 2001.
- [38] W. Greiner. *Relativistic Quantum Mechanics*. Springer, 3 edition, 1991.