



UNIVERSIDAD MICHUACANA DE
SAN NICOLÁS DE HIDALGO
INSTITUTO DE FÍSICA Y MATEMÁTICAS



“ELECTRONES PLANARES EN UN
CAMPO MAGNÉTICO”

T E S I S

PARA OBTENER EL TÍTULO DE
MAESTRO EN CIENCIAS EN EL ÁREA DE FÍSICA

PRESENTA
JOSÉ MANUEL GONZÁLEZ VALDÉS

ASESOR
DR. ALFREDO RAYA MONTAÑO

MORELIA, MICH., JULIO DE 2012.

Índice general

1. Electrones de Schrödinger y Dirac	3
1.1. Ecuación de Schrödinger	3
1.2. Problema de Landau	6
1.3. Ecuación de Dirac	9
1.3.1. Abanico de Landau-Dirac	12
2. Electrones de Bloch	15
2.1. Bloch y Amarre Fuerte	15
2.2. Cadena Lineal	16
2.2.1. Cadena Lineal Poligonal	19
2.2.2. Influencia del Campo Magnético	21
2.2.3. Abanico de Landau	23
2.3. Mariposa de Hofstadter	24
2.3.1. Red Cuadrada Finita	25
2.3.2. Red Cuadrada Infinita	27
3. Grafeno y Sistemas Afines	31
3.1. Grafeno	31
3.1.1. Aspectos Básicos	31
3.1.2. Estructura de Bandas	34
3.2. Red Hexagonal	38
3.3. Cadena Lineal Corrugada	42
3.3.1. Equivalencia de la Red Cuadrada y la Hexagonal	47
3.4. Mariposa de Hofstadter-Dirac	51
3.5. La raíz cuadrada de una mariposa	54
4. Resumen y Conclusiones	55
A. Glosario de Cristalografía	59

Prefacio

En la naturaleza ocurren diferentes fenómenos en las cuales intervienen campos magnéticos como ocurre con la orientación de la brújula con el campo magnético de la tierra y la interacción de imanes entre otros. Estas interacciones ocurren en sistemas macroscópicos así que nos preguntamos qué ocurre en sistemas microscópicos. Para contestar esta pregunta contamos con la mecánica cuántica. Si además tomamos en cuenta las propiedades de los materiales, como su estructura cristalina, la mecánica cuántica debe adaptarse, así que debemos formular la física de materiales. De esta forma podemos estudiar la dinámica de los portadores de carga de un material (a los que nos referiremos genéricamente como electrones) en presencia de un campo magnético uniforme y de esta forma expandir nuestro conocimiento de la física que los rodea. Un fenómeno físico de gran impacto tanto visual como conceptual es el espectro de energía que se forma por la red cristalina bidimensional de ciertos materiales en combinación con un campo magnético uniforme perpendicular a la red, conocido como la mariposa de Hofstadter [1], el cual tiene un comportamiento fractal. Esta forma peculiar del espectro de energía es de gran interés debido a que podemos encontrar un comportamiento similar en otros materiales en donde observemos una red bidimensional. La naturaleza de este espectro se debe a varios factores que intervienen, como son la forma de la red y la intensidad del campo. Entender el espectro de energías en estas circunstancias es de utilidad en diferentes ramas de la física, en particular porque en años recientes se han descubierto experimentalmente materiales novedosos bidimensionales en los que sus “electrones” se comportan como partículas ultrarelativistas, sin masa. Tal es el caso del grafeno [2], y otros como los aislantes topológicos. Estos sistemas están mejor descritos por una ecuación de onda relativista, la ecuación de Dirac, y se caracterizan porque en el espectro aparecen los conos de Dirac, es decir, bandas de energía donde la relación de dispersión energía-momento es lineal. Entonces, de la materia condensada obtenemos una contribución a la física relativista. De igual forma podemos contribuir a la física relativista introduciendo estudios que se obtienen fácilmente haciendo uso de la física de la materia condensada.

En esta tesis realizamos un estudio de los electrones moviéndose en un plano bajo la influencia de un campo magnético perpendicular al material. Para comenzar, damos un breve repaso de los conceptos estudiados en la mecánica cuántica relativista y no relativista, donde se aborda principalmente el problema de un electrón moviéndose en un campo magnético, como se muestra en el Capítulo 1. En el Capítulo 2, damos un resumen de los conceptos necesarios para este trabajo correspondientes a la física de materiales como es el teorema de Bloch y la aproximación de amarre fuerte. Con esto podemos ver cómo es afectado al electrón al moverse dentro de un campo magnético e

introducimos al caso de las redes ya sea de una dimensión, como una cadena de átomos periódica lineal infinita, o una red bidimensional que cumpla con las condiciones de ser red de Bravais y llegar de esta forma al espectro de la mariposa de Hofstadter. Con toda la información reunida, dirigimos nuestra atención al grafeno y a otros sistemas afines. El grafeno es un cristal bidimensional con una red hexagonal. En el Capítulo 3, calculamos el espectro de energía de la red hexagonal y vamos más allá modificando el número de átomos por celda unitaria e introducimos el campo magnético. De esta forma obtenemos una equivalencia entre redes de distintas dimensionalidades y periodicidades y de su espectro de energía. Nuestras conclusiones se presentan en el Capítulo 4, al que prosigue un apéndice con un breve glosario de cristalografía.

Capítulo 1

Electrones de Schrödinger y Dirac

En el presente capítulo realizamos un breve repaso de la mecánica cuántica no relativista y relativista, en especial del problema de un electrón moviéndose en un campo magnético uniforme, también llamado problema de Landau. Seguiremos muy de cerca las Refs. [3],[4],[5],[6],[7],[8],[9].

1.1. Ecuación de Schrödinger

En la mecánica cuántica buscamos las funciones de onda de las partículas $\Psi(x, t)$, resolviendo la ecuación de Schrödinger ¹:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \Psi, \quad (1.1)$$

donde \hbar , es la constante de Planck, dividida por 2π . La ecuación de Schrödinger juega un papel análogo a la segunda ley de Newton: dadas las condiciones iniciales adecuadas, la ecuación de Schrödinger determina $\Psi(x, t)$ para todo el tiempo futuro, de igual forma que en mecánica clásica. ¿Pero qué es exactamente esta función de onda? La respuesta está dada por la interpretación estadística de Born, la cual dice que $|\Psi(x, t)|^2$ es la probabilidad de encontrar a la partícula en el punto x , al tiempo t :

$$\int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx = \left\{ \begin{array}{l} \text{probabilidad de encontrar a la partícula entre} \\ a \text{ y } b, \text{ al tiempo } t. \end{array} \right\} \quad (1.2)$$

La probabilidad es entonces el área bajo la curva de $|\Psi(x, t)|^2$. La interpretación estadística introduce una clase de indeterminación en la mecánica cuántica. Inclusive si conocemos todo lo que tiene que decir la teoría acerca de la partícula, todavía no podemos predecir con certeza el resultado de la medición de un simple experimento al medir, por ejemplo, su posición. La mecánica cuántica ofrece información estadística [3]

¹Hemos tomado los valores de $\hbar = c = 1$ en los cálculos realizados en esta tesis, su presencia es porque son necesarias para el desarrollo teórico o simplemente son parte de teoría.

sobre posibles resultados. Como $|\Psi(x, t)|^2$ es la probabilidad, su integral debe ser igual a 1, debido a que la partícula debe estar en algún lado,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1. \quad (1.3)$$

Sin esto, la interpretación estadística no tendría sentido. Una mirada a la ecuación de Schrödinger revela que si $\Psi(x, t)$ es solución, también lo es $A\Psi(x, t)$, donde A es cualquier constante compleja, lo que nos lleva a tomar este factor multiplicativo asegurando que la Ec.(1.3) se satisfaga. Este procedimiento es llamado “normalización” de la función de onda. Los posibles estados físicos corresponden a soluciones cuadrado-integrables de la ecuación de Schrödinger, los cuales tienen la propiedad de preservar la normalización de la función de onda. Sin esto, la ecuación de Schrödinger sería incompatible con la interpretación estadística y toda la teoría se derrumbaría. Para una partícula en el estado Ψ , el valor de expectación de x es,

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx, \quad (1.4)$$

el cual es el promedio de las medidas realizadas sobre las partículas en todos los estados de Ψ . Indica que de alguna forma debes encontrar una forma de regresar la partícula a su estado original después de cada medición, o si no, debes de preparar un gran ensamble de las partículas, cada una en el estado Ψ y medir las posiciones de todas ellas: $\langle x \rangle$ es el promedio de esos resultados. Resumiendo, el valor de expectación es el promedio de mediciones repetidas en un ensamble de sistemas idénticamente preparados. Ahora, como el tiempo es continuo, el valor de expectación $\langle x \rangle$ debe cambiar, pero aclaremos que la velocidad del valor de expectación de la posición no es igual a velocidad de la partícula. Por el momento es suficiente postular que el valor de expectación de la velocidad es igual a la derivada temporal del valor de expectación de la posición:

$$\langle v \rangle = \frac{d\langle x \rangle}{dt}. \quad (1.5)$$

Si trabajamos el momento ($p = mv$), en vez de la velocidad:

$$\langle p \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt} = m \int \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx, \quad (1.6)$$

decimos que el operador x representa posición y el operador $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ representa el momento. En la mecánica cuántica; para calcular valores de expectación hacemos un “sandwich” del operador apropiado entre Ψ^* y Ψ e integramos. Ahora debemos hablar de la longitud de onda de Ψ , la cual está relacionada con el momento de la partícula por la fórmula de de Broglie,

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}. \quad (1.7)$$

En una visión más general decimos, entre más precisa sea determinada la posición de la partícula, menos preciso es el momento,

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (1.8)$$

donde σ_x es la desviación estándar en x y σ_p es la desviación estándar en p . Este es el principio de incertidumbre de Heisenberg.

Hemos hablado de una función de onda $\Psi(x, t)$ y cómo se usa para calcular varias cantidades de interés. Para obtenerla, necesitamos resolver la ecuación de Schrödinger para un potencial específico $V(x, t)$. Asumiendo que V es independiente de t , la ecuación de Schrödinger puede resolverse por separación de variables [4]. Buscamos soluciones que son un simple producto

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t). \quad (1.9)$$

Por este hecho, sólo obtenemos un pequeño subconjunto de todas las soluciones posibles, pero estas soluciones obtenidas son de gran interés. Las ecuaciones obtenidas son,

$$i\hbar \frac{d\varphi}{dt} = E\varphi, \quad (1.10)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi. \quad (1.11)$$

Mediante separación de variables hemos convertido la ecuación diferencial parcial en dos ecuaciones diferenciales ordinarias, la primera es fácil de resolver y su solución es:

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}. \quad (1.12)$$

La segunda ecuación es llamada la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo o estacionaria; para resolverla, necesitamos especificar el potencial $V(x)$. Solamente mencionaremos los beneficios del uso de separación de variables.

- Son estados estacionarios. A pesar de que la función de onda misma depende de t , la densidad de probabilidad no.

$$|\Psi(x, t)|^2 = \Psi^* \Psi = \psi^* e^{+iEt/\hbar} \psi e^{-iEt/\hbar} = |\psi(x)|^2. \quad (1.13)$$

Lo mismo pasa al calcular el valor de expectación de cualquier variable dinámica,

$$\langle Q(x, t) \rangle = \int \psi^* Q\left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right) \psi dx. \quad (1.14)$$

Todo valor de expectación es constante en el tiempo.

- Son estados con energía total definida. En mecánica clásica la energía total es el Hamiltoniano. El correspondiente operador Hamiltoniano obtenido por la sustitución canónica es,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(\hat{x}). \quad (1.15)$$

Podemos escribir la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo como

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (1.16)$$

Es decir, una solución separable tiene la propiedad de que cada medida de la energía total, con certeza regresa el valor de E .

- La solución general es una combinación lineal de soluciones separables. La ecuación de Schrödinger tiene una colección infinita de soluciones $\psi_i(x)$. A cada una hay asociado un valor de la constante de separación E_i , es decir, hay una función de onda por cada valor permitido de energía:

$$\Psi_i(x, t) = \psi_i(x)e^{-iE_it/\hbar}. \quad (1.17)$$

De esta forma la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tiene la propiedad de que cualquier combinación lineal de soluciones es una solución. Una vez que hemos encontrado una solución separable, podemos formar una solución más general

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_nt/\hbar}. \quad (1.18)$$

Las soluciones separables mismas son estados estacionarios, en el sentido que todas las probabilidades y valores de expectación son independientes del tiempo, pero esta propiedad no es completamente cierta en la solución general.

Enseguida revisaremos un caso particular donde la ecuación de Schrödinger puede resolverse algebraicamente, el problema de una partícula cargada en presencia de un campo magnético uniforme, llamado también el problema de Landau.

1.2. Problema de Landau

Los campos magnéticos se encuentran en todo el universo, desde escalas subatómicas, hasta escalas cosmológicas. A grandes escalas, los campos magnéticos se detectan mediante el llamado efecto Faraday [5], mientras que sus efectos sobre la materia como en el caso de la superconductividad o el efecto Hall cuántico son bien conocidos [6]. Por esta razón, el estudio de la dinámica de las partículas cargadas en presencia de un campo magnético uniforme es de suma importancia. En el caso Clásico, un electrón en un campo magnético externo deja de ser igual al de una partícula libre. Por la presencia de este campo se pierde la isotropía del espacio, traduciéndose a que el movimiento a lo largo de la dirección del campo sea diferente al movimiento en la dirección transversal [7]. Recordemos que para cualquier campo electromagnético, el movimiento de una partícula con carga puntual q , está descrito por la fuerza de *Lorentz*,

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = q(\vec{E}(\vec{r}, t) + \vec{v}(\vec{r}) \times \vec{B}(\vec{r}, t)), \quad (1.19)$$

donde los vectores \vec{r} , \vec{v} , \vec{p} , \vec{E} y \vec{B} son, respectivamente, el vector de posición, velocidad, momento lineal, el campo eléctrico y el campo magnético. Consideremos el caso no relativista, sin el campo eléctrico ($\vec{E} = \vec{0}$), y tomemos el campo magnético de la siguiente forma

$$\vec{B} = B_0 \hat{k}. \quad (1.20)$$

Encontramos directamente que las componentes escalares de la fuerza de Lorentz son

$$\begin{aligned} m\dot{v}_x &= eB_0v_y, \\ m\dot{v}_y &= -eB_0v_x, \\ m\dot{v}_z &= 0. \end{aligned} \quad (1.21)$$

Claramente, no hay fuerza alguna en la dirección del campo magnético, como lo habíamos anticipado. Si analizamos las ecuaciones en la dirección transversa al campo, al tomar la segunda derivada temporal obtenemos las siguientes expresiones,

$$\ddot{v}_x + \left(\frac{eB_0}{m}\right)^2 v_x = 0, \quad \ddot{v}_y + \left(\frac{eB_0}{m}\right)^2 v_y = 0. \quad (1.22)$$

Tomamos las condiciones iniciales de tal forma que la solución a este sistema de ecuaciones se pueda escribir como

$$v_x(t) = v \sin\left(\frac{eB_0}{m}t\right), \quad v_y(t) = v \cos\left(\frac{eB_0}{m}t\right). \quad (1.23)$$

Integrando estas expresiones, podemos ver fácilmente que las coordenadas que describen el movimiento de la partícula son

$$\begin{aligned} x(t) &= -\frac{vm}{eB_0} \cos\left(\frac{eB_0}{m}t\right) + x_0, \\ y(t) &= +\frac{vm}{eB_0} \sin\left(\frac{eB_0}{m}t\right) + y_0. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Estas ecuaciones paramétricas describen un círculo con centro en (x_0, y_0) y radio $r = vm/eB_0$, en donde sólo necesitamos de condiciones iniciales para obtener una solución completa. A la cantidad $w_c \equiv eB_0/m$ se le llama frecuencia del ciclotrón y r es el radio de Larmor o de giro. Notemos que todas las partículas (no relativistas) con el mismo coeficiente de carga y masa e/m tienen la misma frecuencia ciclotrónica w_c y a diferentes radios de Larmor r , tienen distintas energías.

Para el caso cuántico, necesitamos un Hamiltoniano que describa la dinámica anterior. Recordemos ahora que para cualquier campo electromagnético, es posible introducir un potencial escalar $\phi(\vec{r}, t)$ y un potencial vectorial $\vec{A}(\vec{r}, t)$, tales que:

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}, t) &= -\nabla\phi(\vec{r}, t) - \frac{\partial\vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t}, \\ \vec{B}(\vec{r}, t) &= \nabla \times \vec{A}(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (1.25)$$

En términos de estos potenciales, el Lagrangiano del cual se obtiene la fuerza de Lorentz es

$$L = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - q\phi + q\dot{x} \cdot \vec{A}, \quad (1.26)$$

de donde el momento canónico es,

$$\vec{\pi} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} + q\vec{A}, \quad (1.27)$$

el cual, ya no es el momento cinético simple $\vec{p} = m\dot{x}$, sino que ahora aparece un nuevo término que incluye los efectos del campo electromagnético externo. Finalmente, el Hamiltoniano toma la siguiente forma

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\phi, \quad (1.28)$$

la cual también puede derivarse directamente del principio de mínima acción para el sistema. La carga del electrón es $q = -e$, y el campo magnético $\vec{B} = B_0\hat{k}$, permitiendo escribir el Hamiltoniano de la forma,

$$\hat{H} = \frac{\hat{\pi}_1^2 + \hat{\pi}_2^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} = \hat{H}_\perp + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}, \quad (1.29)$$

donde $\hat{\pi} = \hat{p} + e\hat{A}$ es el momento canónico, y el movimiento a lo largo de \hat{k} es libre, i.e. el movimiento en esta dirección no se ve afectado por el campo magnético. Deseamos conocer las soluciones $\psi_n(x)$, para el problema de Landau [6]. Comencemos con el potencial vectorial \hat{A} y usemos la norma de Landau $\hat{A} = -B(0, \hat{x}, 0)$ para definir el campo magnético, de esta forma obtenemos el siguiente Hamiltoniano,

$$\hat{H}_\perp = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{(\hat{p}_y - eB_0\hat{x})^2}{2m}. \quad (1.30)$$

Observemos que el operador \hat{y} no aparece en \hat{H}_\perp , y que por otro lado los conmutadores cumplen con la propiedad $[\hat{x}, \hat{p}_y] = [\hat{p}_y, \hat{p}_x] = 0$, ocasionando que el Hamiltoniano perpendicular cumpla con

$$[\hat{H}_\perp, \hat{p}_y] = 0, \quad (1.31)$$

teniendo a \hat{p}_y como un buen número cuántico ². Si definimos $k = p_y/\hbar$, las funciones de valores propios para el problema deben satisfacerse de forma simultánea,

$$\hat{p}_y\psi(x, y) = \hbar k\psi(x, y), \quad \hat{H}\psi(x, y) = E\psi(x, y). \quad (1.32)$$

Como en la base de coordenadas el operador \hat{p}_y está dado por $-i\hbar\partial/\partial y$, de la primera relación obtenemos

$$\frac{\partial}{\partial y}\psi(x, y) = ik\psi \quad \Rightarrow \quad \psi(x, y) = e^{iky}\phi(x). \quad (1.33)$$

La segunda ecuación de eigenvalores es simplemente la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, y sus soluciones determinan el espectro de energía. Explícitamente tenemos,

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi(x, t) &= \left[\hat{p}_x^2 + (\hat{p}_y - eB_0\hat{x})^2 \right] \frac{e^{iky}\phi(x)}{2m} \\ &= e^{iky} \left[\hat{p}_x^2 + (-\hbar k - eB_0\hat{x})^2 \right] \frac{\phi(x)}{2m} \\ &= e^{iky} \left[\frac{mw_c^2}{2} (\hat{x} - x_0)^2 + \frac{\hat{p}_x^2}{2m} \right] \phi(x) \\ Ee^{iky}\phi(x) &= e^{iky} \left[\frac{mw_c^2}{2} (\hat{x} - x_0)^2 + \frac{\hat{p}_x^2}{2m} \right] \phi(x), \end{aligned} \quad (1.34)$$

donde $w_c = eB_0/m$ y $x_0 = -\hbar k/eB_0$. Reemplazando \hat{p}_x por $-i\hbar\partial/\partial x$ y \hat{x} por x , obtenemos la ecuación diferencial,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{mw_c^2}{2} (x - x_0)^2 \right) \phi(x) = E\phi(x). \quad (1.35)$$

²Son la representación de las cantidades físicas llamadas observables, las cuales tienen la propiedad de conmutar con el Hamiltoniano.

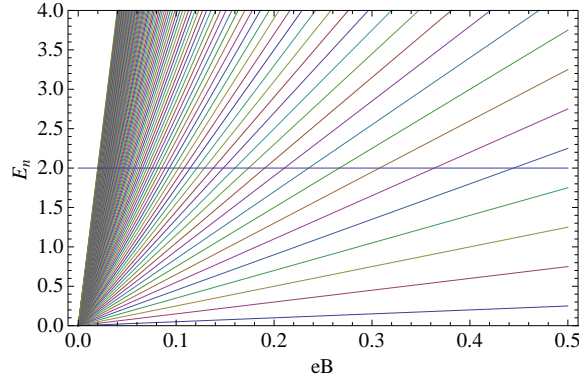


Figura 1.1: Abanico de Landau.

Esta expresión es idéntica a la ecuación de Schrödinger para un oscilador armónico unidimensional con frecuencia w_c , excepto que tenemos un término $(x-x_0)^2$ en lugar de uno x^2 . Por simplicidad tomemos $\bar{x} = x - x_0$, con $x_0 = \frac{p_y}{eB_0}$ sin pérdida de generalidad. Esto simplemente significa que el centro de las oscilaciones se encuentra en $x = x_0$. Podemos ver que nuestro problema bidimensional, en esta norma, es idéntico al de una partícula libre en una dimensión y un oscilador armónico desplazado en la otra. La solución explícita a la ecuación de Schrödinger es de la forma

$$\phi_n(\bar{x}) = \left(\frac{eB_0}{2\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\Phi) e^{-\frac{1}{2}\Phi^2}, \quad (1.36)$$

donde $\Phi = \bar{x}\sqrt{eB_0/2\hbar}$ y $H_n(\Phi)$ son los polinomios de Hermite. Los niveles de energía, llamados también niveles de Landau [8], son

$$E_n = \hbar w_c \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad \text{con} \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (1.37)$$

Notemos también que los niveles de energía no dependen de k , el momento en la dirección y . Cada valor de n puede tener cualquier valor de k , por lo que los niveles de energía están altamente degenerados. Estos niveles de energía se pueden ver en la Figura 1.1, conocida como el abanico de Landau, el cual muestra que la energía tiene un crecimiento lineal con la intensidad del campo. Conforme hay un incremento en n , la pendiente de cada nivel crece desde el valor constante $E_0 = \hbar w_c/2$ correspondiente al nivel más bajo de Landau, hasta hacerse prácticamente verticales cuando $n \rightarrow \infty$. Este espectro de energía toma una forma similar a un abanico, de ahí su nombre. A continuación llevaremos nuestra discusión al dominio relativista.

1.3. Ecuación de Dirac

En mecánica cuántica relativista, las partículas libres de espín 1/2 satisfacen la ecuación de Dirac. A continuación presentamos un análisis de esta ecuación y sus soluciones

en $(3 + 1)$ dimensiones [9]. La energía de una partícula de masa m en ausencia de potenciales es:

$$E = \frac{p^2}{2m}, \quad (1.38)$$

donde p es el momento lineal de la partícula. En mecánica cuántica, las observables físicas se promueven a operadores diferenciales, (con $\hbar = c = 1$):

$$E \rightarrow i \frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} = -i\nabla. \quad (1.39)$$

Entonces la Ec.(1.38) da lugar a la ecuación de Schrödinger:

$$i \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{\nabla^2 \psi(\vec{r}, t)}{2m} = 0. \quad (1.40)$$

Si consideramos la expresión relativista para la energía $E^2 = p^2 + m^2$ y la identificamos con los operadores correspondientes obtenemos,

$$-\frac{\partial^2 \psi(\vec{r}, t)}{\partial t^2} + \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) = m^2 \psi(\vec{r}, t). \quad (1.41)$$

Esta es la ecuación de Klein-Gordon. Podemos escribirla en una forma covariante si usamos las siguientes definiciones,

$$\partial^\mu = (\partial t, -\nabla), \quad \partial_\mu = (\partial t, \nabla), \quad (1.42)$$

y definimos el operador D'Alambertano,

$$\square = \partial_\mu \partial^\mu = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2, \quad (1.43)$$

de modo que podemos reescribir la ecuación de Klein-Gordon [9] como:

$$(\square + m^2)\psi = 0. \quad (1.44)$$

La ecuación relativista de la energía sugiere que

$$E = \pm \sqrt{p^2 + m^2}, \quad (1.45)$$

por lo que además de la solución de energía positiva, tenemos una de energía negativa. Otro problema que tiene la Ec. de Klein-Gordon es que tiene densidades de probabilidad positivas y negativas, esto debido a que el cuadrivector de densidad de probabilidad es

$$j^\mu = (\psi^* \partial^\mu \psi - (\partial^\mu \psi^*) \psi), \quad (1.46)$$

por lo que $\rho = j^0$ es

$$\rho = \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right), \quad (1.47)$$

la cual puede ser negativa, no admitiendo una interpretación probabilística adecuada.

Enseguida estudiaremos la solución al problema de densidades de probabilidad negativas. En 1927 el físico británico Paul Dirac [10] propuso una solución para el problema

de densidades de probabilidad negativas, postulando un Hamiltoniano lineal en las derivadas temporales y por lo tanto en el momento:

$$\hat{H}\psi = (\hat{\alpha} \cdot \hat{p} + \hat{\beta}m_0)\psi = E\psi, \quad (1.48)$$

e impone que este Hamiltoniano satisfaga la relación relativista de energía-momento,

$$\begin{aligned} E^2\psi &= (\hat{\alpha} \cdot \hat{p} + \hat{\beta}m_0)(\hat{\alpha} \cdot \hat{p} + \hat{\beta}m_0)\psi, \\ E^2\psi &= (\hat{p}^2 + m_0^2)\psi, \end{aligned} \quad (1.49)$$

donde $\hat{\alpha}_i$ y $\hat{\beta}$ son matrices. Desarrollando la expresión de la energía, tenemos

$$E^2\psi = \left[\frac{1}{2}(\hat{\alpha}_i\hat{\alpha}_j + \hat{\alpha}_j\hat{\alpha}_i)\hat{p}_i\hat{p}_j + (\hat{\alpha}_i\hat{\beta} + \hat{\beta}\hat{\alpha}_i)\hat{p}_im_0 + \hat{\beta}^2m_0^2 \right] \psi. \quad (1.50)$$

Para que esta expresión concuerde con la energía relativista se requiere que:

$$\{\hat{\alpha}_i, \hat{\alpha}_j\} = 2\delta_{ij} \quad \{\hat{\alpha}_i, \hat{\beta}\} = 0 \quad \hat{\beta}^2 = 1. \quad (1.51)$$

Las matrices de más baja dimensionalidad que satisfacen las relaciones en la Ec.(1.51) son matrices de 4×4 . Nosotros usaremos la representación de Dirac-Pauli, que es la usada con más frecuencia,

$$\hat{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma} \\ \hat{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\beta} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad (1.52)$$

donde $\hat{\sigma}$ son las matrices de Pauli:

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.53)$$

Con el objetivo de obtener la ec. de Dirac en su forma covariante, multipliquemos el Hamiltoniano de Dirac por la izquierda con $\hat{\beta}$, entonces obtenemos que,

$$i\hat{\beta}\frac{\partial\psi}{\partial t} = -i\hat{\beta}\hat{\alpha} \cdot \nabla\psi + m_0\psi. \quad (1.54)$$

Podemos reescribir esta última en su forma covariante,

$$(i\gamma^\mu\partial_\mu - m_0)\psi = 0, \quad (1.55)$$

donde hemos introducido las matrices de Dirac (γ^μ),

$$\gamma^\mu = (\hat{\beta}, \hat{\beta}\hat{\alpha}_i). \quad (1.56)$$

Entonces, la ecuación de Dirac en su forma covariante es:

$$(i\cancel{\partial} - m_0)\psi = 0 \quad \text{ó} \quad (\cancel{p} - m_0)\psi = 0, \quad (1.57)$$

donde estamos utilizando la notación “slash” de Feynman ($\cancel{p} = \gamma^\mu p_\mu$). Tan sólo nos hace falta mencionar la conservación de corriente. Comencemos tomando el complejo conjugado de la ecuación de Dirac:

$$-i\left(\gamma^0\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)^\dagger - i\left(\gamma^k\frac{\partial\psi}{\partial x^k}\right)^\dagger - m_0\psi^\dagger = 0. \quad (1.58)$$

Multiplicando la ecuación anterior por la derecha por γ^0 , se tiene que:

$$-i\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t}\gamma^0\gamma^0 - i\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial x^k}(-\gamma^k)\gamma^0 - m_0\psi^\dagger\gamma^0 = 0. \quad (1.59)$$

Usando que $\gamma^0\gamma^k = -\gamma^k\gamma^0$, e introduciendo el espinor adjunto $\bar{\psi} = \psi^\dagger\gamma^0$ tenemos que la ecuación anterior queda como,

$$i\partial_\mu\bar{\psi}\gamma^\mu + m_0\bar{\psi} = 0. \quad (1.60)$$

Ahora tenemos las herramientas necesarias para derivar la ecuación de continuidad

$$\partial_\mu j^\mu = 0. \quad (1.61)$$

Multiplicando la Ec.(1.55) por la izquierda por $\bar{\psi}$ y la Ec.(1.60) por la derecha por ψ y las sumamos obtenemos,

$$\begin{aligned} \bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi + \partial_\mu\bar{\psi}\gamma^\mu\psi &= 0, \\ \partial_\mu(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) &= 0, \quad \Rightarrow j^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi, \end{aligned} \quad (1.62)$$

que podemos considerar como la densidad de corriente eléctrica si insertamos la carga,

$$j^\mu = -e\bar{\psi}\gamma^\mu\psi, \quad (1.63)$$

por lo que la densidad de probabilidad ρ es:

$$\rho = \psi^\dagger\psi, \quad (1.64)$$

que es positiva definida, por lo que ya no hay conflictos de interpretación probabilística de la función de onda de la ecuación de Dirac.

1.3.1. Abanico de Landau-Dirac

En la física del estado sólido, el comportamiento de los electrones en un campo magnético es usualmente estudiado mediante la ecuación de Schrödinger. Para el caso del grafeno, como veremos en el Capítulo 4, la ecuación de Schrödinger ya no es suficiente, debido a que los grafinos, es decir, las cuasipartículas portadoras de carga en el grafeno, son excitaciones representadas por ecuaciones de onda ultra relativistas. De esta forma, su estudio corresponde a la ecuación de Dirac con masa nula $m = 0$ y el Hamiltoniano toma la forma:

$$H_g = v_f\vec{\sigma}\cdot\vec{p}, \quad (1.65)$$

donde $\vec{\sigma}$ son las matrices de Dirac, que en dos dimensiones espaciales se representan por las matrices de Pauli, \vec{p} es el momento y v_f es la velocidad de Fermi. La estructura por bloques de la ecuación de Dirac nos permite comprender el espectro relativista en el problema de Landau si nos fijamos solamente en el caso del problema de los grafinos. Para obtener el abanico de Dirac-Landau necesitamos, además de un campo magnético uniforme perpendicular al plano (x, y) [11]. Para esto, trabajamos en la norma de Landau $\vec{A} = (0, -Bx, 0)$ y usamos la sustitución de Peierls para el momento $\vec{p} \rightarrow (\vec{p} - e\vec{A})$, obteniendo el siguiente Hamiltoniano:

$$H_g = v_f(\sigma_1\hat{p}_1 + \sigma_2\hat{p}_2) = v_f \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_x - i(\hat{p}_y - eB\hat{x}) \\ \hat{p}_x + i(\hat{p}_y - eB\hat{x}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.66)$$

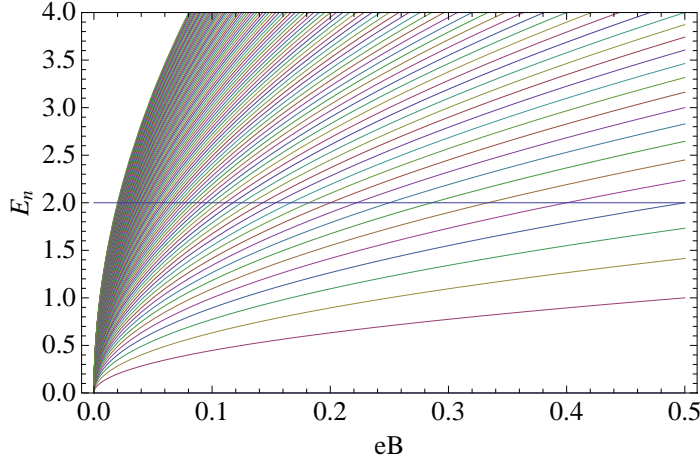


Figura 1.2: Abanico de Dirac-Landau.

y la ecuación de Dirac es,

$$H_g \psi = E\psi, \quad (1.67)$$

donde ψ es el espinor de 2 componentes, lo que se traduce a que al ec. de Dirac se vuelva un sistema de ecuaciones lineales acopladas,

$$\begin{aligned} (\hat{p}_x - i(\hat{p}_y - eB\hat{x}))\psi_b &= E\psi_a, \\ (\hat{p}_x + i(\hat{p}_y - eB\hat{x}))\psi_a &= E\psi_b. \end{aligned} \quad (1.68)$$

Usando el ansatz $\psi_i(x, y) = e^{ip_y y} \psi_i(x)$, podemos reducir a un nuevo sistema de ecuaciones que sólo dependen de una variable,

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + (eB)^2 x^2 \right) \psi_i = (E^2 \pm eB) \psi_i = \epsilon \psi_i, \quad (1.69)$$

donde $\epsilon = E^2 \pm eB$. Esta es claramente la bien estudiada ecuación del oscilador armónico, y sus energías tienen la siguiente forma,

$$\epsilon_n = 2eB \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (1.70)$$

De este modo, obtenemos las energías [12] de las Ec.(1.68) acopladas y son,

$$E_a = \sqrt{2eB(n+1)}, \quad E_b = \sqrt{2eB(n)}, \quad (1.71)$$

donde $n = 0, 1, 2, \dots$, E_a es la energía correspondiente a la componente ψ_a del espinor y E_b es la energía correspondiente a ψ_b . Obtenemos dos soluciones de la energía debido que la ecuación de Dirac gobierna el movimiento de los grafinos ocasionando que aparezcan soluciones de energía negativa y positiva. Graficando estos niveles de energía obtenemos el abanico de Dirac-Landau, el cual se muestra en la Figura 1.2.

Este abanico a diferencia del obtenido mediante la ecuación de Schrödinger, tiene un comportamiento diferente, ya que el crecimiento de la energía es de forma de la raíz cuadrada de la intensidad del campo. Con esto podemos distinguir entre el caso relativista y el no relativista.

En este Capítulo mostramos cómo los electrones, en presencia de un campo magnético, se mueven en el plano transversal a las líneas de campo ya sean gobernados por la ecuación de Schrödinger o Dirac. En la física del estado sólido el análisis de los electrones por medio de estas ecuaciones necesita correcciones adecuadas debido a la estructura cristalina subyacente donde se mueven los electrones. Es suficiente y es necesario introducir nuevos métodos de estudio de electrones en presencia de potenciales periódicos. De esta forma dedicamos el próximo Capítulo al estudio de los electrones de Bloch.

Capítulo 2

Electrones de Bloch

En este Capítulo introducimos uno de los métodos usados en la física de la materia condensada, el teorema de Bloch, el cual se aplica a sistemas con potenciales periódicos, como los encontrados en las estructuras cristalinas de los sólidos. Comenzaremos estudiando una cadena lineal poligonal y el efecto que sufre al tomar en cuenta el campo magnético, permitiéndonos obtener el abanico de Landau. A continuación, consideramos a una red cuadrada, lo que nos conduce al tema de la mariposa de Hofstadter [1], dando un análisis de este efecto magnético.

2.1. Teorema de Bloch y Aproximación de Amarre Fuerte

Felix Bloch probó la importancia de este teorema, que nos dice que las soluciones a la ecuación de Schrödinger para un potencial periódico deben de ser de una forma especial:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\vec{r}) = \mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\vec{r}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}), \quad (2.1)$$

donde cada función $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\vec{r})$ tiene la periodicidad de la red en el cristal, es decir, $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\vec{r}) = \mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\vec{r} - \vec{T})$ para toda \vec{T} en la red de Bravais, donde \vec{T} es un vector de traslación de la red (ver apéndice A para un pequeño glosario de cristalografía). El resultado de la Ec.(2.1) expresa el teorema de Bloch:

Las eigenfunciones de la ecuación de onda para un potencial periódico son el producto de una onda plana $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ por una función $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\vec{r})$ con la periodicidad de la red del cristal.

Una función de onda de un electrón de la forma Ec.(2.1) es llamada una función de Bloch y puede descomponerse en una suma de ondas viajeras. Las funciones de Bloch pueden ensamblarse en paquetes de ondas localizados para representar electrones que se propagan libremente a través del campo de potencial de los núcleos iónicos [13]. Nos referiremos a estos electrones como electrones de Bloch.

La aproximación de amarre fuerte se basa en la idea de que el potencial atómico es profundo y el efecto túnel de los electrones entre los átomos vecinos es débil, tenien-

do la función de onda localizada en los átomos. En esta aproximación, el electrón se describe mediante una amplitud compleja \mathbf{u}_k tal que $P_k = |\mathbf{u}_k|^2$ da la probabilidad de encontrar el electrón en el sitio k [14]. Esta aproximación nos permite conocer la estructura de bandas de los electrones usando un conjunto de funciones de onda localizadas en cada sitio atómico, $\mathbf{u}_k(\vec{r})$, las cuales son eigenfunciones del Hamiltoniano H_{at} de un átomo aislado. Cuando el átomo es puesto en un cristal, esta función de onda atómica se sobrepone con las funciones de átomos adyacentes, y así no son eigenfunciones verdaderas del Hamiltoniano del cristal. La superposición es menor cuando los electrones están fuertemente enlazados. Cualquier corrección al potencial atómico ΔU requiere de obtener el verdadero Hamiltoniano del sistema, que se asume pequeña:

$$H(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}_k} H_{at}(\vec{r} - \vec{T}_k) + \Delta U(\vec{r}), \quad (2.2)$$

donde una solución $\psi_k(\vec{r})$ a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un electrón se aproxima mediante una combinación lineal de orbitales atómicos,

$$\psi_k(\vec{r}) = \sum_{\vec{T}_k, l} b_k(\vec{T}_l) \mathbf{u}_k(\vec{r} - \vec{T}_l). \quad (2.3)$$

Aquí l es el nivel de energía y \vec{T}_k da la localización en la red del cristal.

Una forma particular del teorema de Bloch, la cual es válida cuando la función $\psi_k(\vec{r})$ es no degenerada, surge cuando consideramos una red unidimensional de N puntos idénticos con forma de anillo de longitud Na . El potencial energía es periódico en $a = |\vec{a}|$, con $U(x) = U(x + sa)$, donde s es un entero. Ahora, si nos guiamos por la simetría del anillo, para encontrar las soluciones de la ecuación de onda tales que cumpla la condición,

$$\psi(x + a) = C\psi(x), \quad (2.4)$$

donde C es una constante, dando una vuelta alrededor del anillo se debe cumplir,

$$\psi(x + N\vec{a}) = \psi(x) = C^N \psi(x). \quad (2.5)$$

Como $\psi(x)$ debe ser univaluada, se sigue que C es una de las N raíces de la unidad, o

$$C = \exp\left(\frac{i2\pi s}{N}\right); \quad s = 0, 1, 2, \dots, N - 1. \quad (2.6)$$

Podemos ver entonces que

$$\psi(x) = \mathbf{u}_k(x) \exp\left(\frac{i2\pi sx}{Na}\right), \quad (2.7)$$

satisface la condición buscada. Aquí \mathbf{u}_k tiene la periodicidad en a , tal que cumple con $\mathbf{u}_k(x) = \mathbf{u}_k(x + a)$, con $k = i2\pi s/(Na)$, obtenemos el resultado de Bloch Ec.(2.1). Enseguida estudiaremos en detalle esta cadena unidimensional.

2.2. Cadena Lineal

Consideremos una cadena lineal infinita de átomos con masa m conectados por resortes de constante B y $a = |\vec{a}|$ el espacio entre cada masa. La posición de equilibrio define

una red 1-D, donde los vectores \vec{R}_j de la red se definen como,

$$\vec{R}_j = j\vec{a}, \quad (2.8)$$

siendo \vec{a} el vector base. Los vectores \vec{R}_j conectan el origen a todos los puntos en la red. Sea \vec{r}_i el desplazamiento de la masa i -ésima de su posición de equilibrio y sea \vec{p}_i el momento correspondiente. Además consideremos N masas e impongamos condiciones de frontera periódicas $\vec{r}_i = \vec{r}_{i+N}$, debido a que una buena aproximación a la cadena lineal infinita es conectar los extremos de la cadena formando un círculo. El Hamiltoniano para este sistema es,

$$H = \frac{1}{2m} \sum_i p_i^2 + \frac{1}{2}B \sum_i (\vec{r}_i - \vec{r}_{i+1})^2. \quad (2.9)$$

Usemos la representación de la transformada de Fourier,

$$\vec{r}_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \vec{\mathbf{r}}_k e^{ikja}, \quad \vec{p}_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \vec{\mathbf{p}}_k e^{-ikja}, \quad (2.10)$$

donde \vec{r}_j y \vec{p}_j son el desplazamiento y el momento en el espacio de coordenadas y $\vec{\mathbf{r}}_k, \vec{\mathbf{p}}_k$ en el espacio de Fourier. Como resultado de las condiciones periódicas los valores permitidos de k son,

$$k = \frac{2\pi n}{Na}. \quad (2.11)$$

Podemos invertir la Ec.(2.10) obteniendo,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \vec{r}_j e^{-ik'ja} &= \frac{1}{N} \sum_k \sum_j \vec{\mathbf{r}}_k e^{i(k-k')ja}, \\ &= \frac{1}{N} \sum_j \vec{\mathbf{r}}_j \delta_{kk'} \\ &= \vec{\mathbf{r}}_{k'}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Por otro lado notemos que $\mathbf{r}_k^\dagger = \mathbf{r}_k$, $\mathbf{p}_k^\dagger = \mathbf{p}_k$, debido a que las coordenadas y momentos deben ser reales. Estos satisfacen las relaciones de conmutación,

$$\begin{aligned} [\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_{k'}] &= \frac{1}{N} \sum_{j,j'} e^{i(kj-k'j')a} [p_j, r_{j'}], \\ &= \frac{1}{N} \sum_{j,j'} e^{i(kj-k'j')a} (-i\hbar \delta_{jj'}), \\ &= -i\hbar \frac{1}{N} \sum_j e^{i(k-k')ja}, \\ &= -i\hbar \delta_{kk'}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

donde \mathbf{p}_k y $\mathbf{r}_{k'}$ conmutan excepto en caso que $k = k'$. El desplazamiento descrito por \mathbf{r}_k es igual a aquellos desplazamientos descritos por $\mathbf{r}_{k+(2\pi n)/a}$ para cualquier entero n

dado,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{r}_{k+(2\pi m)/a} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j r_j e^{-i(k+\frac{2\pi m}{a})ja}, \\
 &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j r_j e^{-ikja}, \\
 &= \mathbf{r}_k.
 \end{aligned} \tag{2.14}$$

Por lo tanto, k se define como,

$$k \equiv k + \frac{2\pi n}{a}. \tag{2.15}$$

Restringiendo nuestra atención a $n = 0, 1, \dots, N-1$ en k obtenida por las condiciones de frontera, podemos escribir el Hamiltoniano de una forma diferente,

$$H = \sum_k \left[\frac{1}{2m} \mathbf{p}_k \mathbf{p}_k^\dagger + 2B \left(\sin \frac{ka}{2} \right) \mathbf{r}_k \mathbf{r}_k^\dagger \right]. \tag{2.16}$$

Recordando la solución para el problema del oscilador armónico, definimos los operadores (de aniquilación y creación):

$$\begin{aligned}
 a_k &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left[\left(4mB \left(\sin \frac{ka}{2} \right) \right)^{\frac{1}{4}} \mathbf{r}_k + \frac{i}{\left(4mB \left(\sin \frac{ka}{2} \right)^2 \right)^{\frac{1}{4}}} \mathbf{p}_k \right], \\
 a_k^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left[\left(4mB \left(\sin \frac{ka}{2} \right) \right)^{\frac{1}{4}} \mathbf{r}_k^\dagger - \frac{i}{\left(4mB \left(\sin \frac{ka}{2} \right)^2 \right)^{\frac{1}{4}}} \mathbf{p}_k^\dagger \right],
 \end{aligned} \tag{2.17}$$

Los cuales satisfacen $[a_k, a_k^\dagger] = 1$. Entonces el Hamiltoniano puede escribirse en términos de estos operadores,

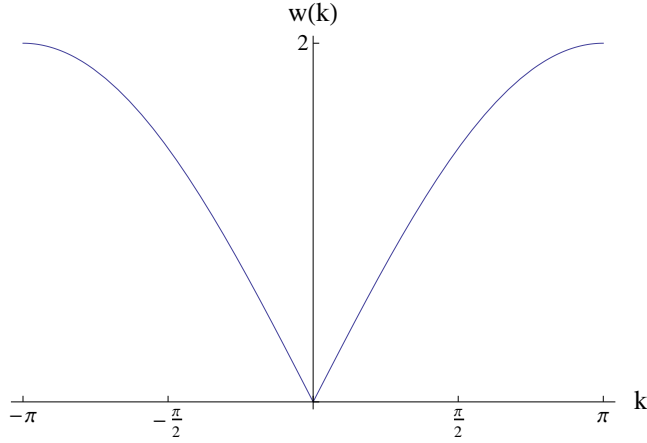


Figura 2.1: Relación de dispersión w_k vs k para la cadena lineal infinita, con $m = B = a = 1$.

$$H = \sum_k \hbar w_k \left(a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2} \right), \tag{2.18}$$

donde w_k es,

$$w_k = 2 \left(\frac{B}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|. \quad (2.19)$$

Esta es la frecuencia como función del número de onda (relación de dispersión) que se muestra en la Fig. 2.1. Así, vemos que la cadena lineal es equivalente a un sistema de N osciladores armónicos independientes. Su termodinámica puede ser descrita por la distribución de Bose. Los operadores a_k^\dagger, a_k se dice que crean y aniquilan fonones. Decimos que un estado $|\psi\rangle$ con,

$$a_k^\dagger a_k |\psi\rangle = N_k |\psi\rangle, \quad (2.20)$$

tiene N_k fonones de momento k . Fonones son los cuantos de vibración de la red, y son análogos a los fotones, que son los cuantos de las oscilaciones de los campos electromagnéticos. Observemos que, con $k \rightarrow 0$ y $w_k \rightarrow 0$:

$$w_{k \rightarrow 0} = \left(\frac{Ba^2}{m} \right)^{\frac{1}{2}} k. \quad (2.21)$$

La razón física para esto es simple, un oscilador con $k = 0$ es una traslación uniforme de una cadena lineal, en la cual no hay costo alguno de energía. Notemos que la razón para esto es que el Hamiltoniano es invariante bajo traslaciones $u_i \rightarrow u_i + \lambda$, pero el estado base no lo es: Las masas están localizadas en los puntos $x_j = ja$. La invarianza en la traslación ha sido rota espontáneamente. Por supuesto, también pudo romperse con $x_j = ja + \lambda$, por esta razón $w_k \rightarrow 0$ cuando $k \rightarrow 0$. Un modo oscilatorio de este tipo es conocido como modo de Goldstone.

2.2.1. Cadena Lineal Poligonal

Recordando los resultados de los orbitales de un molécula de hidrógeno H_2 [15], usando las etiquetas para los átomos A y F y expresando la función de onda como una combinación lineal de los orbitales atómicos ¹,

$$|\psi\rangle = c_A |\psi_A\rangle + c_F |\psi_F\rangle, \quad (2.22)$$

el Hamiltoniano para un electrón puede ser escrito como,

$$H = -\frac{1}{2m} \nabla^2 + V_A + V_F, \quad (2.23)$$

donde V_A y V_F son la energía de atracción de cada electrón al centro de la molécula de hidrógeno. La integral diagonal, que puede ser aproximada por la energía de amarre del electrón a su centro, está dada por

$$E_0 = \langle \psi_A | H | \psi_A \rangle, \quad (2.24)$$

y la integral de resonancia t está dada por,

$$t = \langle \psi_A | H | \psi_F \rangle, \quad (2.25)$$

¹Hemos introducido abruptamente la notación de Dirac para los estados por una razón que será evidente enseguida.

Figura 2.2: Cadena lineal de N átomos

la cual es la energía del electrón cuando éste se encuentra en una región sobrepuesta entre los centros, es decir, t es la integral de transferencia o de salto. Si tomamos solamente la interacción entre los vecinos más cercanos, la ecuación de Schrödinger toma la forma referida en la literatura del estado sólido como ecuación secular,

$$|H_{ij} - E\delta_{ij}| = \begin{vmatrix} E_0 - E & t \\ t & E_0 - E \end{vmatrix} = 0, \quad (2.26)$$

que es un problema de valores propios, cuyas soluciones son de la forma:

$$E = E_0 \pm t. \quad (2.27)$$

Las correspondientes eigenfunciones son el “bonding” σ y “antibonding” σ^* de los orbitales moleculares del átomo de hidrógeno.

Ahora podemos encontrar los niveles de energía para una cadena lineal de N átomos como se muestra en la Figura 2.2, extendiendo el resultado anterior. Tomando solamente las interacciones de los vecinos más cercanos, la ecuación para resolver una cadena lineal de N átomos, es

$$\begin{vmatrix} E_0 - E & t & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ t & E_0 - E & t & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & t & E_0 - E & t & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & E_0 - E & t \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & t & E_0 - E \end{vmatrix} = 0, \quad (2.28)$$

donde las soluciones tiene la siguiente forma [16],

$$E = E_0 - 2 |t| \cos\left(\frac{\pi M}{N+1}\right), \quad (2.29)$$

donde $M = 1, 2, 3, \dots, N$ y N son los niveles de energía de la cadena lineal [17]. Notemos que existen tantos niveles de energía como número de átomos y la degeneración de la energía aumenta de acuerdo al número de átomos. Con estos resultados, podemos resolver el problema de una cadena lineal de N átomos con los extremos de la cadena unidos formando un polígono. En este caso tenemos una matriz idéntica a la de la cadena lineal, pero con una interacción extra con el átomo final e inicial, con lo que la

matriz toma la forma,

$$\begin{vmatrix} E_0 - E & t & 0 & 0 & \dots & 0 & t \\ t & E_0 - E & t & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & t & E_0 - E & t & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & E_0 - E & t \\ t & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & E_0 - E \end{vmatrix} = 0. \quad (2.30)$$

En este caso las soluciones son de la forma,

$$E = E_0 - 2 |t| \cos\left(\frac{2\pi M}{N}\right), \quad (2.31)$$

donde $M = 1, 2, 3, \dots, N$ representa los niveles de energía. Tenemos que los niveles de energía son doblemente degenerados, excepto en los bordes: para el bonding $E = E_0 - 2 |t|$ y para el antibonding $E = E_0 + 2 |t|$, los cuales existen para toda N par. Debido a la alta simetría del polígono, los orbitales moleculares se encuentran más fácilmente porque cada sitio está simétricamente relacionado. Si escribimos la función de onda del sitio n -ésimo ψ_n , esta simetría implica,

$$\psi_n = e^{i\phi} \psi_{n-1} \quad \text{Teorema de Bloch.} \quad (2.32)$$

La ecuación de Schrödinger se escribe entonces como ²,

$$H\psi_n = E\psi_n = -|t| \psi_{n-1} - |t| \psi_{n+1} + E_0\psi_n. \quad (2.33)$$

Como estamos dando a la cadena la estructura de un polígono, $\psi_{N+1} = \psi_1$ y por el teorema de Bloch tenemos que $\phi = 2\pi M/N$, por lo tanto la energía toma la forma,

$$E = E_0 - 2 |t| \cos(\phi). \quad (2.34)$$

Este mismo análisis se realiza para los diferentes valores de N de la cadena poligonal. En la Figura 2.3 se muestran cuatro valores diferentes de la cadena poligonal: la Figura 2.3 - a) corresponde a las órbitas moleculares en el H_2 , la figura 2.3 - c) es de cuatro átomos y forma un cuadrado que corresponde a cualquier cristal con red cuadrada y la Figura 2.3 - d) es una hexagonal que corresponde al benceno o en nuestro caso al grafeno, el cual se estudiará en los capítulos posteriores.

2.2.2. Influencia del Campo Magnético

A continuación consideramos el efecto de un campo magnético uniforme perpendicular al plano de cadena poligonal. Para esto, recordemos que el operador del momento \hat{p} es el generador de las traslaciones espaciales:

$$\hat{T}(\vec{l}) = \exp(i\vec{p} \cdot \vec{l}), \quad (2.35)$$

donde $\hat{T}(\vec{l})$ es el operador de traslación, el cual nos da el valor de la función de onda dentro de un potencial periódico, en la forma

$$\psi(\vec{r} + \vec{l}) = \hat{T}(\vec{l})\psi(\vec{r}). \quad (2.36)$$

²A continuación podemos ver los beneficios del uso de la notación de Dirac.

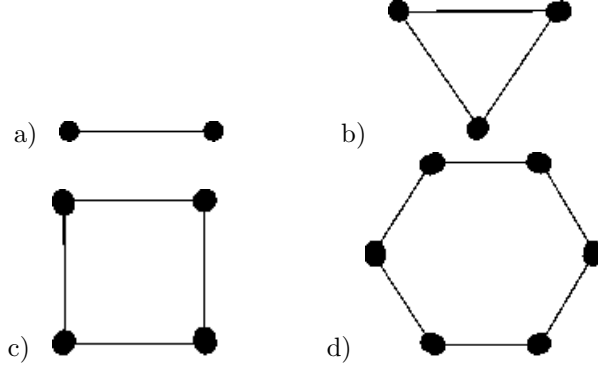


Figura 2.3: Representación de cadenas poligonales para a) dos átomos, b) tres átomos, c) cuatro átomos y d) seis átomos

Si añadimos el campo magnético, el operador de momento \hat{p} se reemplaza por un operador que incluye potencial al vectorial magnético \hat{A} ,

$$\hat{p} \rightarrow \hat{p} + e\hat{A}, \quad (2.37)$$

que es la llamada sustitución de Peierls. Esto es, el efecto del campo magnético introduce un factor de fase extra en una función de onda trasladada. Así:

$$\psi(\vec{r} + \vec{l}) = \exp\left(ie \int_r^{r+l} \vec{A} \cdot d\vec{l}'\right) \hat{T}(\vec{l})\psi(\vec{r}). \quad (2.38)$$

Si el camino a lo largo del cual nos trasladamos es cerrado, la función de onda trasladada adquiere un factor de fase de la forma,

$$\exp\left(ie \oint \vec{A} \cdot d\vec{l}'\right) = \exp\left(2\pi i \frac{\Phi}{\Phi_0}\right) = \exp(2\pi i \alpha), \quad (2.39)$$

donde $\Phi = \int \vec{B} \cdot d\vec{S}$ el flujo magnético a través de la superficie encerrada por el camino, Φ_0 es el flujo cuántico y $\alpha = \Phi/\Phi_0$ es el número flujos cuánticos que pasan a través de la superficie encerrada por el camino.

Para ilustrar el efecto del campo magnético en los niveles de energía, retomaremos el problema de la cadena poligonal anterior. Primero tomemos el campo magnético perpendicular al polígono. Entonces la Ec.(2.33) toma la siguiente forma,

$$\begin{aligned} H\psi_n &= E\psi_n \\ &= -|t| e^{-2\pi i \alpha/N} \psi_{n-1} - |t| e^{2\pi i \alpha/N} \psi_{n+1} + E_0 \psi_n. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Usando el teorema de Bloch, obtenemos los eigenvalores de la energía :

$$\begin{aligned} E\psi_n &= -|t| \psi_n (e^{-2\pi i \alpha/N} e^{-2\pi i M/N} + e^{2\pi i \alpha/N} e^{2\pi i M/N}) + E_0 \psi_n \\ E &= E_0 - 2|t| \cos\left(\frac{2\pi}{N}(M + \alpha)\right). \end{aligned} \quad (2.41)$$

Esto se ilustra en la Figura 2.4. Sin pérdida de generalidad, hemos tomado $E_0 = 0$, porque este parámetro es simplemente una constante aditiva. Para el espectro de energía

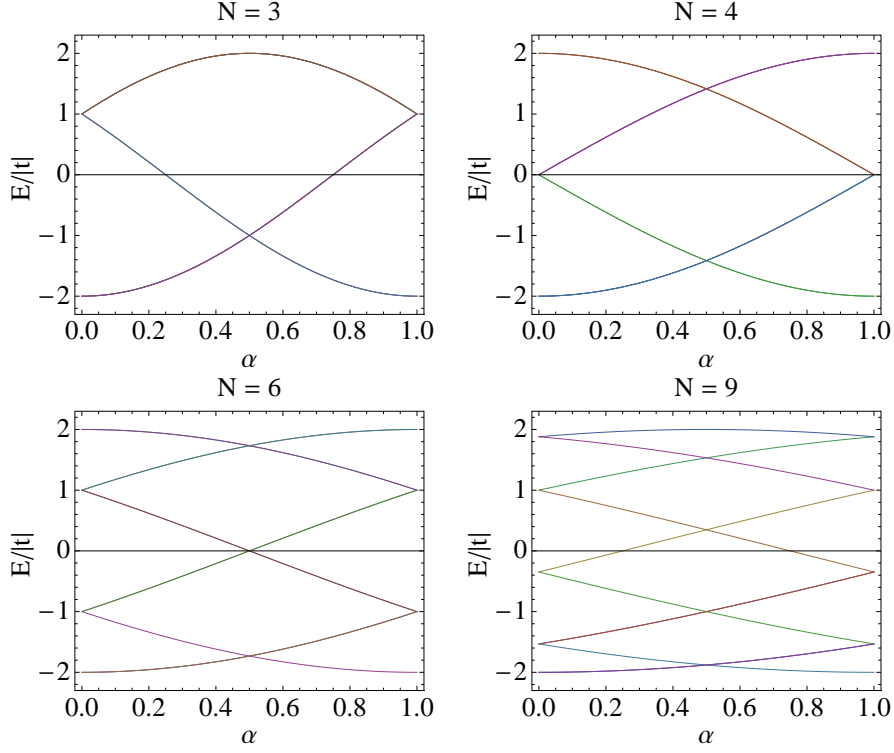


Figura 2.4: Espectro de energía para órbitas atómicas sobre un polígono con N vértices (átomos).

con $N = 6$ átomos, observamos que la energía se divide en 6 niveles correspondientes a $E/|t| = (-1, 1, -2, 2)$, donde los niveles ± 1 están degenerados y además observamos dos ejes de simetría, uno en $\alpha = 0,5$ y el otro $E/|t| = 0$. El espectro de energía está acotado, con un ancho de $4|t|$. Además hay una notable diferencia entre los casos de N par o impar: Un N par lleva a un espectro simétrico respecto a reflexiones a lo largo de la línea $E/|t| = 0$.

2.2.3. Abanico de Landau

Nuevamente vamos a tratar el tema del abanico de Landau en este formalismo. En física del estado sólido, el estudio de los electrones en un campo magnético se realiza mediante el siguiente Hamiltoniano,

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A})^2. \quad (2.42)$$

Si escribimos $\pi = (\vec{p} + e\vec{A})/\sqrt{eB}$ y tomando la norma de Landau, como se mostró en el Capítulo 2 de esta tesis, el problema es equivalente al de un oscilador armónico y los eigenvalores correspondientes son

$$E = w_c \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (2.43)$$

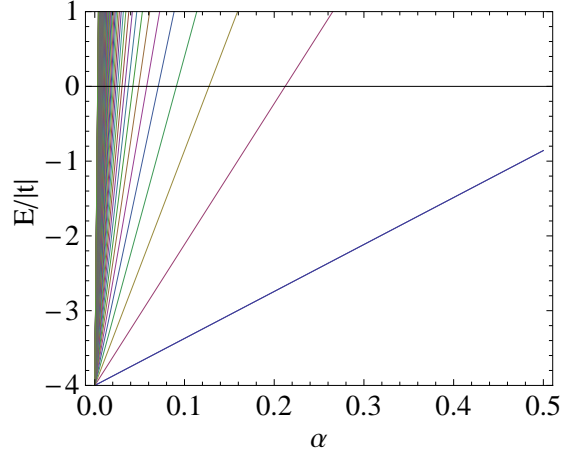


Figura 2.5: Espectro del Abanico de Landau.

Estos niveles de energía se conocen como los niveles de Landau. Para campos magnéticos débiles, los electrones son casi libres, de modo que en la aproximación de amarre fuerte 2-D (como se verá en la siguiente sección), la energía para $\vec{k} \rightarrow \vec{0}$ es de la forma,

$$E(k) = -4 |t| + \frac{1}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2), \quad (2.44)$$

donde la masa efectiva en términos de los parámetros de amarre fuerte es $m^* = 1/(2a^2 |t|)$. Como la frecuencia es

$$w_c = \frac{eB}{m^*} = 4\pi\alpha |t|, \quad (2.45)$$

los niveles de Landau más próximos al fondo de la banda pueden escribirse de la forma,

$$\frac{E}{|t|} = -4 + 4\pi\alpha \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (2.46)$$

En la Figura 2.5 tenemos el abanico de Landau, dado por la Ec.(2.46), la cual tiene el mismo comportamiento que en el caso de la energía calculada por la ecuación de Schrödinger, el cual se muestra en la Figura 1.1.

2.3. Mariposa de Hofstadter

La Mariposa de Hofstadter se refiere a un fractal descubierto por Douglas Hofstadter en su publicación “Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields” [1]. La mariposa de Hofstadter fue el primer fractal que se formuló en la física. La mariposa da una versión gráfica del espectro de energía de un electrón restringido a moverse en un potencial periódico bidimensional bajo la influencia de un campo magnético perpendicular. Para estudiar este sistema, veamos primero la dinámica de los electrones de Bloch en una red cuadrada finita e infinita.

2.3.1. Red Cuadrada Finita

Queremos extender el análisis la sección 2,2 al caso de un cristal bidimensional. Para ello, formularemos un modelo de amarre fuerte perteneciente a una sección finita de una red cuadrada de espaciado a . Comencemos escribiendo la función de onda del

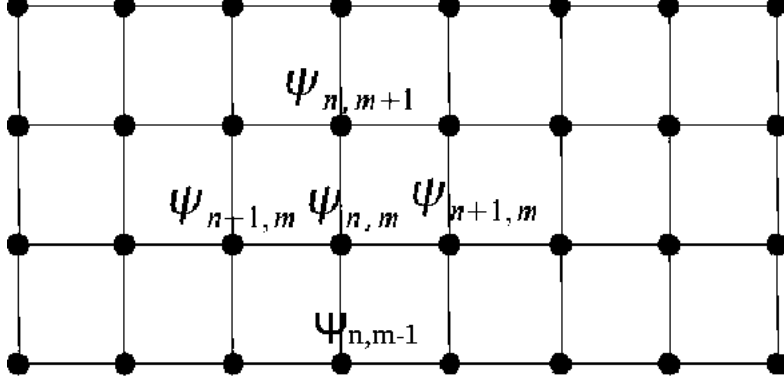


Figura 2.6: red cuadrada finita de N elementos

sitio $(x, y) = (na, ma)$ como $\psi_{n,m}$, de acuerdo la Figura 2.6, y solamente tomemos en cuenta su interacción con sus vecinos más cercanos. En la aproximación de amarre fuerte, tenemos que

$$-t[\psi_{n-1,m} + \psi_{n+1,m} + \psi_{n,m-1} + \psi_{n,m+1} + \psi_{n,m}] = E\psi_{n,m}. \quad (2.47)$$

Usando el teorema de Bloch bidimensional,

$$\psi_{n,m} = e^{ik_x na} e^{ik_y ma} U(k), \quad (2.48)$$

podemos reducir la expresión en la siguiente forma:

$$-t[e^{-ik_x a} + e^{ik_x a} + e^{-ik_y a} + e^{ik_y a} + 1]U(k) = EU(k). \quad (2.49)$$

Con esto obtenemos la forma del espectro de energía, mostrado en la Figura 2.7, para la red cuadrada,

$$-2t[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] = E. \quad (2.50)$$

La expansión para $|\vec{k}| \rightarrow 0$, encontramos nuevamente la relación (2.44) como lo habíamos anticipado. Ahora, para escribir la Ec.(2.47) en forma secular, notemos que los únicos elementos no cero correspondientes de la matriz secular son

$$\begin{aligned} \langle \psi_{n,m} | H | \psi_{n,m\pm 1} \rangle &= t, \\ \langle \psi_{n,m} | H | \psi_{n\pm 1,m} \rangle &= t, \\ \langle \psi_{n,m} | H | \psi_{k,l} \rangle &= E_0 \delta_{nk} \delta_{ml}, \end{aligned} \quad (2.51)$$

con t , al igual que antes es la integral de transferencia o de salto.

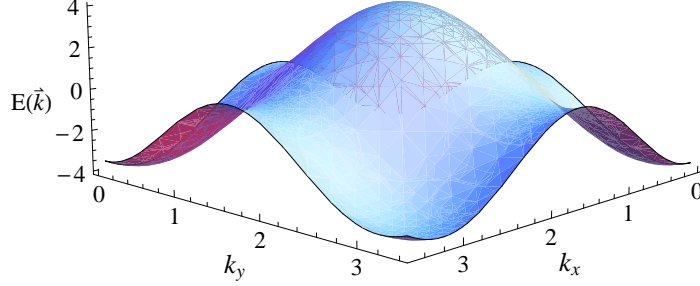


Figura 2.7: Espectro de energía de la red cuadrada finita.

De igual forma, podemos ahora incluir la influencia del campo magnético en el espectro de energías usando la Ec. (2.38). Además, si el potencial magnético está definido en la norma de Landau $A = (0, -Bx, 0)$, podemos pasar de un problema 2-dimensional a otro problema 1-dimensional. De esta forma, la función de onda ψ se puede escribir como el producto de una onda plana que depende solamente de y y una función φ que sólo depende de x , es decir,

$$\psi(x, y) \rightarrow e^{ip_y y} \varphi(x), \quad (2.52)$$

donde podemos observar que el efecto del campo magnético solamente está presente en la dirección \hat{y} del eje coordenado, por lo que el teorema de Bloch toma la siguiente forma,

$$\psi_{n,m} = e^{ik_x n a} e^{ik_y m a} e^{2\pi i m \alpha} \varphi_n(x). \quad (2.53)$$

Con estos resultados, nuestra aproximación de amarre fuerte toma la siguiente forma,

$$-t[\psi_{n-1,m} + \psi_{n+1,m} + e^{-2\pi i m \alpha} \psi_{n,m-1} + e^{2\pi i m \alpha} \psi_{n,m+1} + \psi_{n,m}] = E\psi_{n,m}. \quad (2.54)$$

Aplicando el teorema de Bloch, podemos reducir términos obteniendo,

$$E\varphi_n = -t[e^{-ik_x a} \varphi_{n-1} + e^{ik_x a} \varphi_{n+1} + 2\cos(2\pi\alpha n + k_y a)\varphi_n]. \quad (2.55)$$

Finalmente nos fijamos que en $\vec{k} = 0$ obtenemos la ecuación de Harper,

$$[E + 2t\cos(2\pi\alpha n)]\varphi_n = -t[\varphi_{n-1} + \varphi_{n+1}]. \quad (2.56)$$

Esta ecuación de Harper se resuelve de forma matricial [18] y la energía que de ella se obtiene solamente se puede resolver de una forma numérica y el resultado se describe

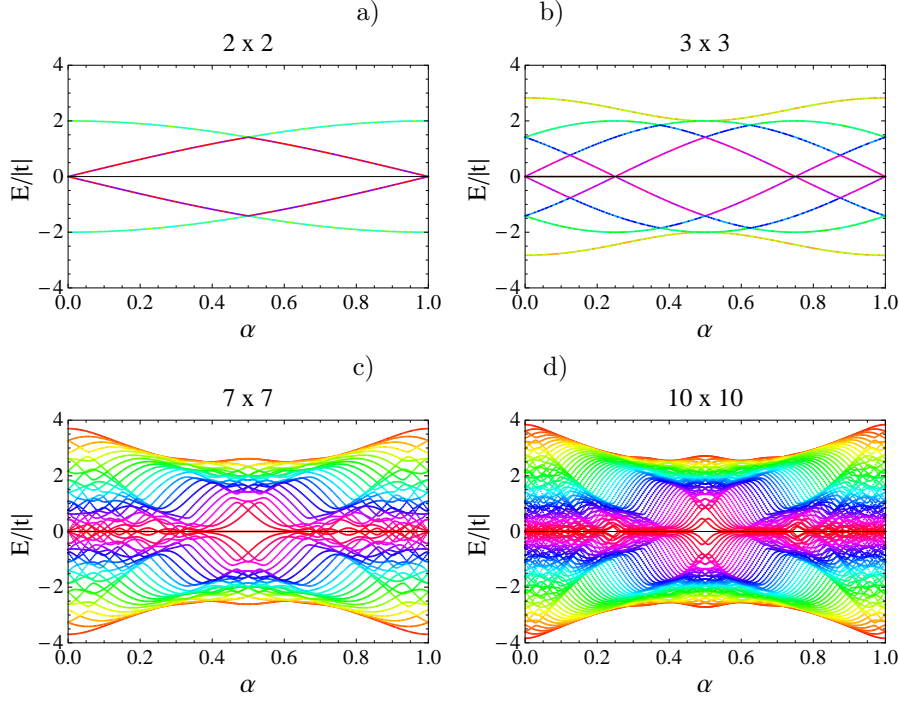


Figura 2.8: Espectro de energías de una red cuadrada, de a) 2×2 sitios, b) 3×3 sitios, c) 7×7 sitios y d) 10×10 sitios, los cuales son análogo al de anillos de 4, 9, 49 y 100 átomos.

de acuerdo a la Figura 2.8. En dicha figura mostramos el espectro para red finitas. La Figura 2.8 - a) muestra el espectro de energías para una red de 4 (2×2) sitios y es idéntico a la gráfica del espectro de energías de un polígono de $N = 4$ átomos como en la Figura 2.4. La Figura 2.8 - b) es para 9 (3×3) sitios. Cuando $B = 0$ hay 9 niveles, que consisten de dos niveles con una sola degeneración, dos niveles de doble degeneración y un nivel “nonbonding” ($E = 0$) de degeneración triple. Con un número impar de sitios en la red, siempre habrá un nivel “nonbonding” que persiste para toda α . Con un número par de sitios, los niveles de energía repetidamente cruzan la línea $E = 0$ como una función de α . Como podemos ver en la Figura 2.8 - a). El ancho de banda es $4t$ para 4 sitios. A medida que el número de sitios crece, nos vamos aproximando a la mariposa de Hofstadter que describiremos a continuación.

2.3.2. Red Cuadrada Infinita

Consideremos ahora la situación anterior en una red cuadrada infinita. Comencemos tomando una red cuadrada de forma similar que en la Sección 2.3.1, solamente que en esta ocasión es infinita. Aquí tenemos nuevamente un problema magnético de Bloch. Usando la aproximación de amarre fuerte para un electrón y tomando las mismas condiciones que la sección anterior, nuevamente obtenemos,

$$E \varphi_m = -t[e^{-ik_x a} \varphi_{m-1} + e^{ik_x a} \varphi_{m+1} + 2 \cos(2\pi\phi m + k_y a) \varphi_m]. \quad (2.57)$$

Si tomamos $\vec{k} = \vec{0}$ y suponemos que la función de onda tiene forma de onda plana, obtenemos la forma final de la ecuación de Harper,

$$\varphi_{m-1} + 2 \cos(2\pi \phi m) \varphi_m + \varphi_{m+1} = \epsilon \varphi_m, \quad (2.58)$$

donde ϕ es el flujo magnético en una celda unitaria en unidades de fluxón magnético, $\epsilon = E/t$ es la energía. La Ec. (2.58) también describe a una electrón que se mueve a lo largo de una cadena lineal en un potencial $\cos(2\pi \phi m)$. Esta ha sido estudiada en gran detalle, por ejemplo, en la Ref. [19]. Aquí presentamos un recuento de los resultados discutidos ahí. La cantidad ϕ especifica el cociente entre el período del potencial y el período correspondiente al acoplamiento a primeros vecinos. Aquí se nota la diferencia del efecto de los valores racionales e irracionales de ϕ . Si el flujo magnético de un número racional, $\phi = p/q$ con p y q enteros y primos relativos, entonces el potencial es conmesurado con la red de un período p . Es un ejemplo de un espectro de energías fractal. Cuando el parámetro de flujo α es racional e igual a p/q , con p y q primos relativos, el espectro consiste de q bandas de energía que no se superponen entre sí y por lo tanto $q+1$ espacios de energía. Cuando α es irracional, el espectro es el conjunto de Cantor. Los espacios (“gaps”) en el espectro corresponden a valores enteros de la conductividad Hall.

El espectro de la ecuación de Harper se encuentra formado por q bandas. Cerca de cualquier número racional encontramos un q arbitrariamente grande al igual que números irracionales con $q \rightarrow \infty$. Consecuentemente se pueden encontrar al espectro como función de ϕ que posee un número arbitrario de bandas en la vecindad de espectros que poseen un número finito. De esta forma, la diferencia entre números racionales e irracionales se hace evidente en un fenómeno físico. La sustitución de Peierls es válida únicamente para campos magnéticos débiles por lo que la ecuación de Harper obtenida sólo es válida bajo tales condiciones.

Para estudiar este sistema para el régimen de campos magnéticos intensos, debemos observar que los niveles de Landau se rompen en sub-bandas. Si el campo magnético es lo suficientemente intenso, la separación entre los niveles de Landau w es lo suficientemente grande para que el acoplamiento entre las sub-bandas de dos niveles contiguos sea despreciable, en cuyo caso el efecto sobre cualquiera de los niveles de Landau se puede considerar por separado. Es interesante observar que en el límite es posible encontrar una ecuación similar a (2.58) en la cual el flujo magnético ϕ es sustituido por su inverso, llamado $\sigma = 1/\phi$. Por otro lado, si el acoplamiento entre los niveles de Landau es débil pero no despreciable, será suficiente tomar en cuenta sólo algunos niveles de Landau en los cálculos de la energía y otras cantidades relevantes. El espectro se obtiene de diagonalizar el siguiente Hamiltoniano al tomar $\vec{k} = \vec{0}$,

$$H(k_1, k_2) = \begin{vmatrix} V_0 & \lambda e^{-i\sigma b k_1} & 0 & \dots & 0 & \lambda e^{i\sigma b k_1} \\ \lambda e^{i\sigma b k_1} & V_1 & \lambda e^{-i\sigma b k_1} & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ \lambda e^{-i\sigma b k_1} & 0 & 0 & \dots & \lambda e^{i\sigma b k_1} & V_{p-1} \end{vmatrix}, \quad (2.59)$$

donde $V_m = 2 \cos(2\pi \sigma m + \sigma b k_2)$ es el potencial periódico. Al diagonalizar esta matriz obtenemos los eigenvalores de la energía como función del inverso del flujo magnético correspondientes al espectro de la mariposa de Hofstadter. En matemáticas, una

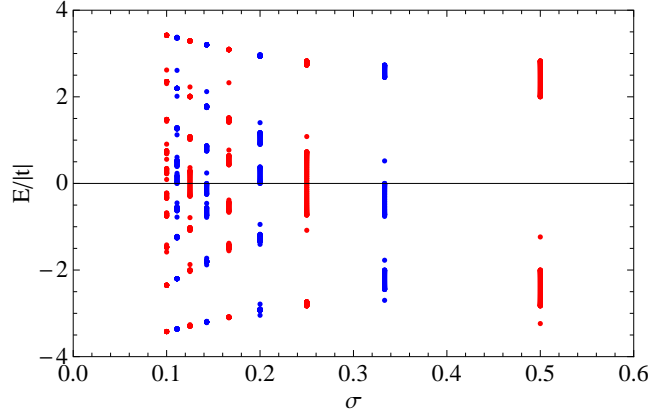


Figura 2.9: Bandas de energía de la red cuadrada, tomando a $\sigma = 1/n$ con n entero.

función

$$f(x, y) = \frac{\log [\text{Det} |L(y) - x|]}{q}, \quad (2.60)$$

con $L(y) = H(0, 0)$, se llama el exponente de Lyapunov, mientras que el espectro de la mariposa corresponde al conjunto de puntos tales que $f(x, y) = 0$. El espectro se obtiene fijando el valor de $\sigma = p/q$ donde p y q son primos relativos. En la Fig. 3.24 mostramos el espectro correspondiente a

$$\sigma = \frac{1}{n}, \quad n = 2, 3, \dots, 10. \quad (2.61)$$

Como se explica en la Ref. [19], en $\sigma = 1/2$ hay dos bandas, una en el intervalo $E/|t| \in [-2\sqrt{2}, 0]$ y la otra en $E/|t| \in [0, 2\sqrt{2}]$, y dado que se tocan en $E/|t| = 0$, aparentan ser una sola. Nuevamente observamos que las energías permitidas son $-4 |t| \leq E \leq 4 |t|$ y el ancho de banda es $8t$. Lo mismo ocurre para $\sigma = 1/4$ donde existen cuatro bandas en total pero se observan sólo tres dado que dos de ellas se tocan en $E/|t| = 0$. Sin embargo, por la precisión numérica que estamos trabajando, no podemos apreciar claramente la estructura de bandas recién descrita. La matriz $H(k_1, k_2)$ es de dimensión p por lo que encontramos un número total de p estados por cada nivel de Landau. A medida que variamos \vec{k} , cada una de las p energías cambia de valor obteniéndose así la estructura de bandas. Para cada valor de σ se obtiene un número total de p bandas por cada nivel de Landau. En la presencia del campo magnético, el espectro de energía es el de la mariposa de Hofstadter, el cual corresponde a la Figura 2.10. Podemos ver que el espectro posee dos ejes de simetría en $\sigma = 1/2$ y en $E/|t| = 0$. Réplicas de la figura de la mariposa, formada por las cuatro alas en forma de equis, se repiten reiteradamente al interior de la misma escaladas por un factor que en general depende de la energía y del flujo magnético. Se dice entonces que la mariposa de Hofstadter tiene una estructura multifractal. Una característica del espectro de la mariposa es que está compuesto por bandas. Cuando $\sigma = p/q$ (p y q enteros) el espectro comprende de q sub-bandas de Landau y por lo tanto el espectro tiene una

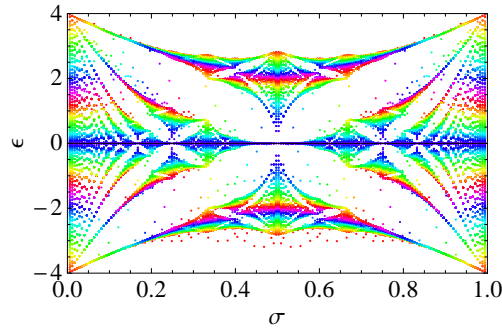


Figura 2.10: Espectro de energía de la red cuadrada en un campo magnético, también conocido como mariposa de Hofstadter.

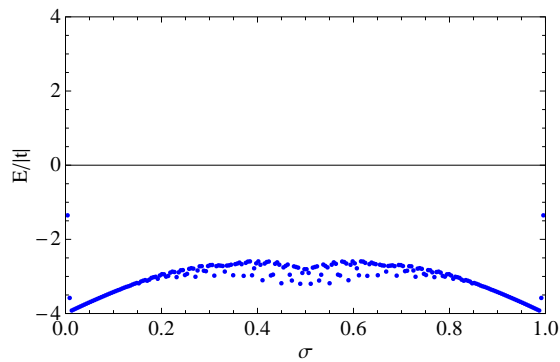


Figura 2.11: Banda de energía más baja en la mariposa de Hofstadter .

dependencia compleja del campo magnético. El espectro graficado en la Figura 2.8 - d) muestra que si el tamaño de un sistema finito se incrementa, la apariencia del espectro comienza a aproximarse al de la mariposa de Hofstadter. De hecho, el patrón obtenido en la red finita tiene un parecido al patrón de la mariposa, pero con una diferencia importante: Las redes finitas tienen valores de energías donde están prohibidas para red infinitas. Estas energías están esparcidas y no degeneradas. A la inversa, energías que corresponden a estados posibles en la mariposa de Hofstadter son densos y altamente degenerados. Podemos, por lo tanto, ver que la estructura de ensanchamiento de los niveles de Landau en la mariposa de Hofstadter surge en sistemas finitos. También podemos mostrar que para el nivel más bajo de Landau, el cual se muestra en la Figura 2.11, el comportamiento de este nivel es similar al encontrado en el abanico de Landau para la ecuación de Schrödinger que se mostró con anterioridad en el dominio de B pequeño. En el siguiente capítulo estudiaremos los mismos efectos en grafeno y sistemas afines.

Capítulo 3

Grafeno y Sistemas Afines

En este capítulo vamos a hablar del Grafeno. Trataremos varios aspectos y propiedades de este material que nos son de interés, como su estructura de bandas y en particular, la compararemos con la correspondiente red cuadrada. Veremos una equivalencia que existe entre la red hexagonal y la red cuadrada, así como entre este arreglo de panal de abeja y la cadena lineal corrugada. Abordaremos uno de los temas centrales de esta tesis, que es la obtención de la mariposa de Dirac-Hofstadter.

3.1. Grafeno

3.1.1. Aspectos Básicos

Grafeno es el nombre dado a una sola capa de átomos de carbono fuertemente enlazados en una red con forma de panal de abejas bidimensional ($2D$), como se muestra en la Figura 3.1 - a) y es la estructura básica de construcción de materiales de grafito de otras dimensiones. Puede ser envuelta en fullerenos $0D$, enrollados en nanotubos $1D$ o apilados en grafito $3D$, ver Figura 3.1 - b) [23]. Teóricamente, el grafeno ha sido estudiado por años y extensamente usado para describir propiedades de varios materiales con base de carbono. En los primeros años de su estudio, se pensó que el grafeno tan sólo era una analogía excelente de la materia condensada a la electrodinámica cuántica $(2 + 1)D$, lo cual situó al grafeno a un simple modelo teórico de juguete. Por otro lado, se presumía que el grafeno no existía en un estado libre, siendo descrito solamente como un material “académico” y se creía que era inestable con respecto a la formación de estructuras curvas tales como el tizne, fullerenos y nanotubos. En un instante, el modelo clásico se volvió una realidad, cuando grafenos en estado libre se encontraron, ver Figura 3.2 - a) y en especial, cuando los siguientes experimentos confirmaron que sus portadores de carga son fermiones de Dirac¹ no masivos. Hace más de 70 años, Landau y Peierls [20] [21] argumentaron que, estrictamente, cristales de 2 dimensiones eran termodinámicamente inestables y no podían existir. Su teoría se basa en que la contribución de las fluctuaciones térmicas en la red de cristales de bajas dimensiones hacen que los desplazamientos de los átomos sean comparables con

¹Esta nomenclatura es comúnmente usada en la física de materia condensada, debido a que también se encuentran fermiones no relativistas, de Majorana y otros.

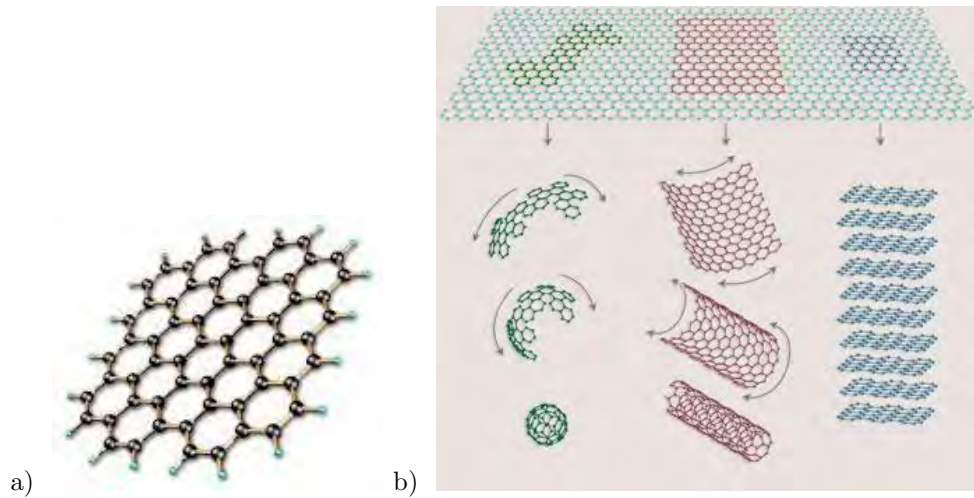


Figura 3.1: a) Representación de la red del grafeno y b) Representación de las diferentes formas de manipular una sola capa del grafeno para obtener otras estructuras gráficas [23].

las distancias interatómicas a cualquier temperatura finita. Este argumento fue soportado posteriormente y apoyado por diversas observaciones experimentales. Por esta razón, una sola capa de átomos se consideraba como una parte integral de grandes estructuras de 3 dimensiones y se creía que no existían, hasta el año 2004, cuando el conocimiento común fue sacudido por el descubrimiento experimental del grafeno [24], ver Figura 3.2 - b) y otros cristales de átomos libres $2D$ [25]. Estos cristales pudieron ser obtenidos en la superficie de sustratos no cristalinos, en suspensiones líquidas y como membranas suspendidas. Los cristales en $2D$ se encontraron no solamente como

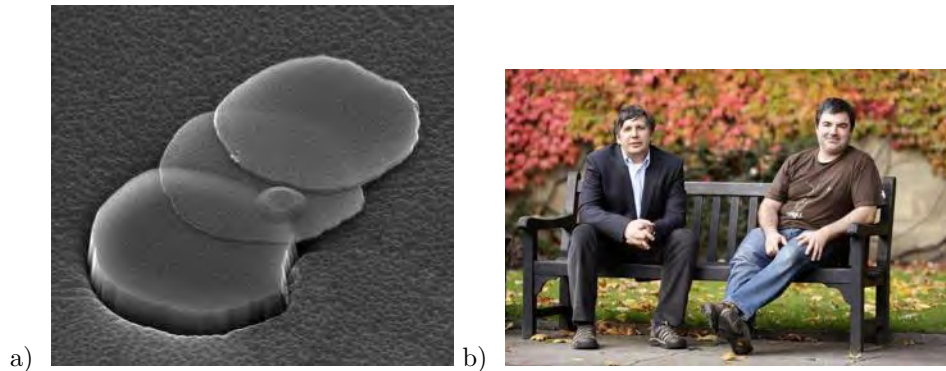


Figura 3.2: a) Fotografía del grafeno y b) Físicos experimentales que aislaron las primeras muestras del grafeno, Andre Geim y Konstantin Novoselov, ganadores del Premio Nobel de Física 2010.

continuos, si no que también exhibieron altas cualidades cristalinas. Para el caso del grafeno, los portadores de carga pueden viajar miles de distancias interatómicas sin

presentar dispersión. Se puede argumentar que los cristales obtenidos en $2D$ son enfriados en un estado metaestable, porque son extraídos de materiales 3-dimensionales. Considerando su tamaño pequeño ($\ll 1mm$) y sus fuertes enlaces interatómicos, se puede garantizar que las fluctuaciones térmicas no llevan a la generación de dislocaciones u otros defectos cristalinos inclusive a elevadas temperaturas. Por sus excepcionales descubrimientos experimentales en este material, los físicos Andrei Geim y Konstantin Novoselov fueron galardonados con el Premio Nobel de Física 2010. En la Fig. 3.3 se muestran algunas propiedades de este material. Los cristales $2D$ son una sola capa

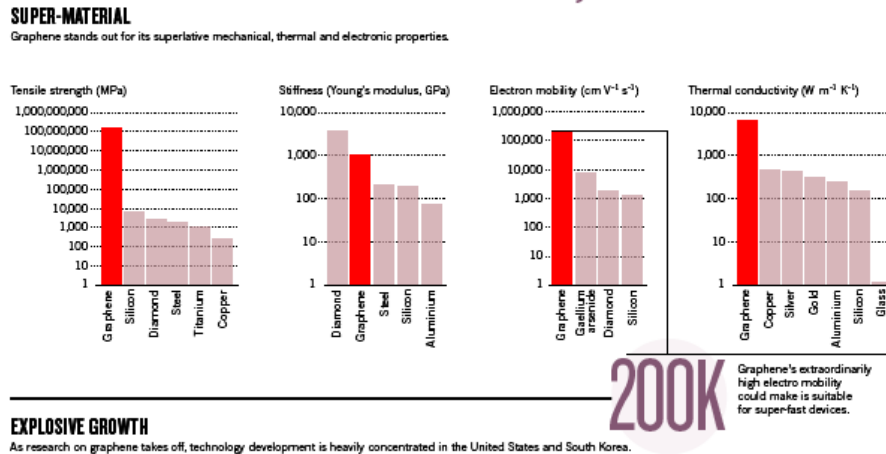


Figura 3.3: Algunas propiedades notables del Grafeno [22].

atómica mientras que 100 capas deben ser consideradas como una película delgada de un material en $3D$. Para el caso del grafeno, la situación de tener un material en $2D$ u otro en $3D$ se observa en que la estructura electrónica rápidamente evoluciona con el número de capas, aproximándose al límite de $3D$ del grafito en 10 capas. Por otra parte, sólo el grafeno monocapa y el bicapa tiene un espectro electrónico simple: ambos son semi-conductores con cero-gap (también se puede referir como semimetales con cero-traslape) con un tipo de electrones y un tipo de agujeros. Para 3 o más capas, el espectro se vuelve increíblemente complicado: varios portadores de carga aparecen y las bandas de conducción y valencia comienzan a sobreponerse una con otra de forma notable. Esto nos permite distinguir entre una, dos o unas cuantas capas de grafeno (de 3 a < 10) como tres diferentes tipos de cristales $2D$. A pesar de existir toda una nueva clase de materiales $2D$, todos los experimentos y esfuerzos teóricos se han concentrado en el grafeno y de algún modo se ha ignorado la existencia de los otros cristales. Esto se debe principalmente a la excepcional calidad electrónica exhibida por los cristales de grafeno aislados. Una razón igualmente importante es la naturaleza única de los portadores de carga. En la física de la materia condensada, la ecuación de Schrödinger gobierna a los cristales; usualmente su naturaleza es suficiente para describir las propiedades electrónicas de los materiales. El grafeno es una excepción. Sus portadores de carga imitan partículas relativistas y es más fácil describirlas con la ecuación de Dirac. Aunque no hay nada relativista en los electrones moviéndose alrededor de los átomos de carbono, su interacción con un potencial periódico como la red

hexagonal del grafeno da origen a nuevas cuasi-partículas (que nosotros llamaremos simplemente "electrones"), las cuales a bajas energías E , son descritas de forma precisa por la ecuación de Dirac en $2 + 1$ dimensiones, con una velocidad de la luz efectiva $v_f \approx 10^6 m/s$ o velocidad de Fermi [23]. Estas cuasi-partículas son fermiones de Dirac sin masa, y pueden ser vistas como electrones que perdieron su masa en reposo m_0 o como neutrinos que adquirieron una carga e . A estas excitaciones se les ha dado el nombre de grafinos [26]. La descripción relativista de ondas de electrones sobre una red con forma de panal ya es conocida y nos proporciona una forma de probar fenómenos de electrodinámica cuántica (QED) mediante la medición de propiedades electrónicas del grafeno.

3.1.2. Estructura de Bandas

Para el análisis de la estructura de bandas del grafeno, tenemos que profundizar un poco en los métodos usados en la física de estado sólido. Como sabemos, el grafeno tiene una estructura de tipo de panal de abeja, en otras palabras una red con una estructura hexagonal y lo podemos analizar por medio de la ecuación de Dirac,

$$H_D = \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m. \quad (3.1)$$

Para los grafinos tomamos $m = 0$. Con esto, tenemos excitaciones representadas por

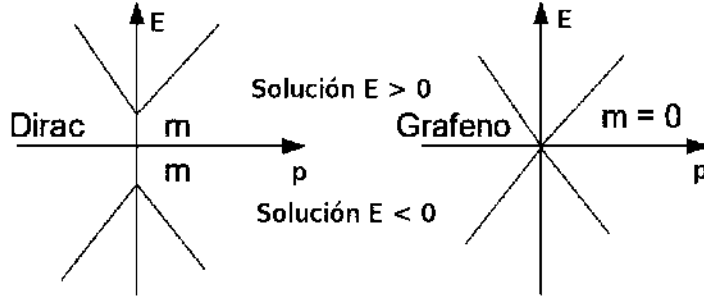


Figura 3.4: Representación del espectro de Dirac y grafeno. Las soluciones de Dirac están separadas por dos veces la masa de los electrones.

una ecuación de onda ultrarelativista, haciendo que los términos de masa se anulen, ocasionando que la separación entre los conos de Dirac en el grafeno sea nula, como se observa en la Figura 3.4. De esta forma, la ecuación de onda para los grafinos es,

$$H_g \psi = \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \psi \equiv E \psi, \quad (3.2)$$

donde tomamos las siguientes unidades $\hbar = 1$, $v_F = 1$ y $\vec{\sigma}$ son las matrices de Pauli. Consideremos un gas de electrones libres confinados en una región bidimensional del plano (x, y) . El Hamiltoniano correspondiente es,

$$H_g^{lib} = \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Una vez que tenemos la forma del Hamiltoniano para el grafeno, tomamos la influencia del campo magnético. La interacción de \vec{B} se introduce vía el momento generalizado.

Usando la norma de Landau $\hat{A} = -(0, Bx, 0)$ para definirlo, la influencia del potencial vector sólo ocurre a lo largo del eje p_y , así que el Hamiltoniano del grafeno toma la siguiente forma,

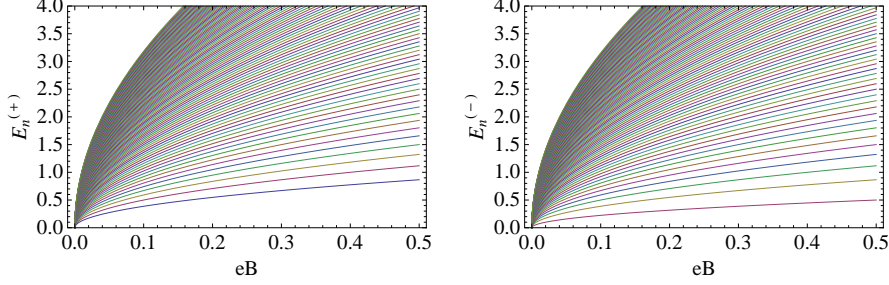


Figura 3.5: Comportamiento de la energía del grafeno, para $E_n^{(+)}$ y $E_n^{(-)}$.

$$\hat{H}_g = \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_x - i(\hat{p}_y - eB\hat{x}) \\ \hat{p}_x + i(\hat{p}_y - eB\hat{x}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Tal como vimos en el Capítulo 1, el problema de Landau para grafenos se reduce a una partícula libre en una dimensión y un oscilador armónico desplazado en la otra, cuyas energías son [27],

$$E_n^{(+)} = \sqrt{2eB(n+1)}, \quad E_n^{(-)} = \sqrt{2eBn}. \quad (3.5)$$

En la Figura 3.5 se muestra el comportamiento de la energía en el grafeno, tanto para la componente superior (+) como la inferior (-) de la función de onda.

Ahora analizaremos el modelo de amarre fuerte para el grafeno. Consideremos sólo interacciones de los vecinos cercanos. Ya que trabajamos con una celda unitaria que contiene dos átomos en ella, clasificamos los átomos en dos redes de Bravais triangulares que son equivalentes a la red hexagonal y etiquetamos los sitios de una de ellas con Φ (círculos blancos) y a los de la otra red (círculos negro) con Ψ , ver Figura 3.6. La ecuación del amarre fuerte toma la forma,

$$\begin{aligned} -t(\Phi_{n+1,m-1} + \Phi_{n+1,m+1} + \Phi_{n,m}) &= E\Psi_{n,m}, \\ -t(\Psi_{n-1,m-1} + \Psi_{n-1,m+1} + \Psi_{n,m}) &= E\Phi_{n,m}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Para proseguir, necesitamos conocer la estructura cristalina de la red. Primero los vectores primitivos de cada subred triangular son,

$$\vec{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}a}{2}, \frac{a}{2} \right) \quad \text{y} \quad \vec{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}a}{2}, -\frac{a}{2} \right). \quad (3.7)$$

Estos vectores cumplen con $\|\vec{a}_1\| = \|\vec{a}_2\| = a$, y en grafeno $a \approx 5\text{\AA}$. Los vectores primitivos de la red recíproca \vec{b}_1 y \vec{b}_2 satisfacen,

$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}, \quad (3.8)$$

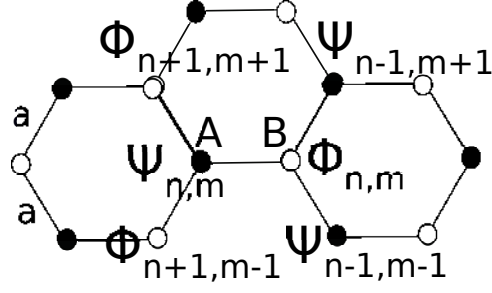


Figura 3.6: Arreglo de las funciones $\Phi_{n,m}$ y $\Psi_{n,m}$ en la red hexagonal del grafeno.

por lo que podemos darles la siguiente representación,

$$\vec{b}_1 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad \text{y} \quad \vec{b}_2 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right). \quad (3.9)$$

Entonces, el teorema de Bloch para el grafeno nos permite escribir,

$$\begin{aligned} \Psi_{n,m} &= \exp \left(i \frac{\sqrt{3}}{2} k_x a n + \frac{i}{2} k_y a m \right) U(\vec{k}), \\ \Phi_{n,m} &= \exp \left(i \frac{\sqrt{3}}{2} k_x a n - \frac{i}{2} k_y a m \right) V(\vec{k}). \end{aligned} \quad (3.10)$$

Por otro lado, las funciones $U(\vec{k})$ y $V(\vec{k})$ cumplen con las siguientes propiedades,

$$U(\vec{k} + \vec{G}) = U(\vec{k}), \quad V(\vec{k} + \vec{G}) = V(\vec{k}), \quad (3.11)$$

donde $\vec{G} = n_1 \vec{b}_1 + n_2 \vec{b}_2$ y n_1, n_2 son enteros. Entonces, las funciones de onda Ψ_n y Φ_n toman la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \Psi_{n+1,m+1} &= \exp \left(i \frac{\sqrt{3}}{2} k_x a (n+1) + \frac{i}{2} k_y a (m+1) \right) U(\vec{k}), \\ \Psi_{n+1,m-1} &= \exp \left(i \frac{\sqrt{3}}{2} k_x a (n+1) + \frac{i}{2} k_y a (m-1) \right) U(\vec{k}), \\ \Phi_{n-1,m+1} &= \exp \left(i \frac{\sqrt{3}}{2} k_x a (n-1) + \frac{i}{2} k_y a (m+1) \right) V(\vec{k}), \\ \Phi_{n-1,m-1} &= \exp \left(i \frac{\sqrt{3}}{2} k_x a (n-1) + \frac{i}{2} k_y a (m-1) \right) V(\vec{k}). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Si sustituimos estas expresiones en el conjunto de funciones (3.6), encontramos que,

$$\begin{aligned} -t \left(2e^{i \frac{\sqrt{3}}{2} k_x a} \cos \left(\frac{k_y a}{2} \right) + 1 \right) U(\vec{k}) &= E V(\vec{k}), \\ -t \left(2e^{-i \frac{\sqrt{3}}{2} k_x a} \cos \left(\frac{k_y a}{2} \right) + 1 \right) V(\vec{k}) &= E U(\vec{k}). \end{aligned} \quad (3.13)$$

Este conjunto de ecuaciones puede ser escrito en forma matricial,

$$\begin{pmatrix} 0 & \Delta(\vec{k}) \\ \Delta^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U(\vec{k}) \\ V(\vec{k}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} U(\vec{k}) \\ V(\vec{k}) \end{pmatrix}, \quad (3.14)$$

donde $\Delta(\vec{k}) = -t - 2t \exp(i(\sqrt{3}/2)k_x a) \cos(k_y a/2)$. De este modo, reducimos el problema a uno de valores propios, del cuál podemos desprender que los valores para la energía [28]. Elevando al cuadrado, tenemos que

$$\begin{pmatrix} \Delta(\vec{k}) & 0 \\ 0 & \Delta(\vec{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U(\vec{k}) \\ V(\vec{k}) \end{pmatrix} = E^2 \begin{pmatrix} U(\vec{k}) \\ V(\vec{k}) \end{pmatrix}, \quad (3.15)$$

de tal forma que

$$E = \pm \Delta(\vec{k}) = \pm \sqrt{4t^2 \cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4t^2 \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) + t^2}. \quad (3.16)$$

El espectro correspondiente se muestra en la Figura 3.7. Tiene forma periódica en

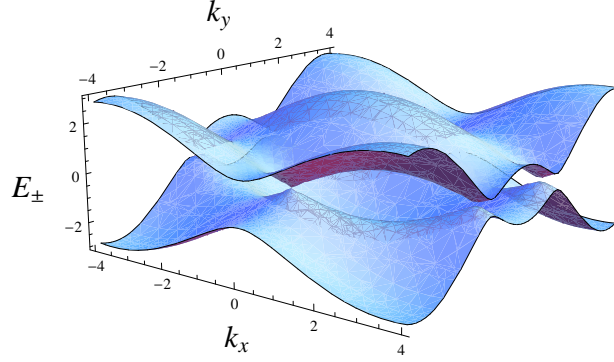


Figura 3.7: Espectro de energía del grafeno obtenido a partir de las dos redes de Bravais triangulares.

ambas bandas de energía, la de conductividad y la de valencia, tocándose solamente en los puntos donde la energía es mínima o máxima según corresponda, es decir, de esta forma las bandas de valencia y de conducción se tocan en los llamados puntos de Dirac. Con este resultado procedemos a ver como se ve el Hamiltoniano. Comencemos con las coordenadas $\vec{K} = (2\pi/(\sqrt{3}a), 2\pi/(3a))$, al sustituirlas en $\Delta(\vec{k})$, se reduce a la forma,

$$\begin{aligned} \Delta(\vec{k} + \vec{K}) &= (i\sqrt{3}ae^{i\pi} \cos(\pi/3), -ae^{i\pi} \sin(\pi/3)) \cdot (k_x, k_y) \\ &= \frac{\sqrt{3}ta}{2}(k_y - ik_x). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Si hacemos un cambio en el nombre de los ejes $y \rightarrow x'$ y $x \rightarrow y'$, el Hamiltoniano finalmente toma la forma,

$$H = \frac{\sqrt{3}at}{2\hbar} \begin{pmatrix} 0 & \hbar(k_{x'} - ik_{y'}) \\ \hbar(k_{x'} + ik_{y'}) & 0 \end{pmatrix} \equiv v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{p}, \quad (3.18)$$

donde hemos identificado a $v_f \approx c/300$ con la velocidad de Fermi. De esta forma, se puede aproximar el valor de $t \approx 2,7eV$. La energía que se encontró anteriormente contiene dos signos (\pm), debido a que el estudio de la red hexagonal se realiza mediante la ecuación de Dirac, la cual genera dos soluciones, y no por la ecuación de Schrödinger con la que se vienen realizando los cálculos de las redes anteriores. La forma cónica de las bandas de conducción y valencia cerca de los puntos de Dirac son llamados conos de Dirac. Con este último resultado hemos concluido la parte correspondiente al grafeno y lo que falta es mencionar otros sistemas con comportamientos análogos al grafeno, de los cuales daremos una revisión no exhaustiva.

3.2. Red Hexagonal

En esta sección realizaremos un análisis más profundo de la red hexagonal, mostrando con ello varios aspectos relevantes de este arreglo cristalino. Recordemos, una red de Bravais es un arreglo infinito de puntos discretos con un ángulo y orientación que parecen ser exactamente el mismo desde cualquier punto de donde se vea (ver apéndice). Con esta propiedad en mente, la red hexagonal no es una red de Bravais. Esto

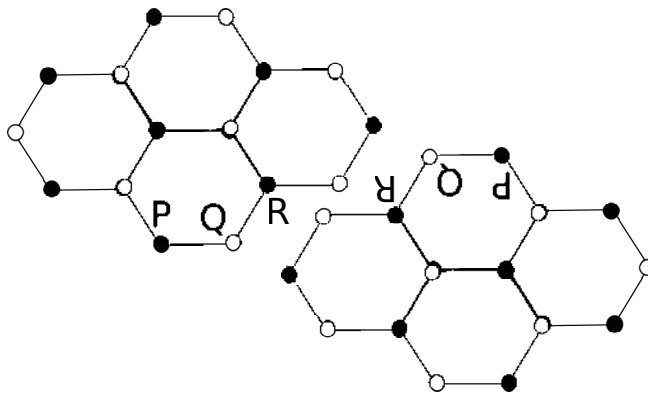


Figura 3.8: a) *Vértices del panal P, Q y R tomados como referencia para las simetrías.*

es porque, como se muestra en la Figura 3.8 - a), el arreglo de puntos tiene el mismo aspecto desde P y R, pero desde Q está desfasado 180° . La celda de Wigner-Seitz es la región del espacio que está más cerca a un punto en la red que a cualquier otro, como se muestra en la Figura 3.8 - b), esta celda en la red recíproca es conocida como la primera zona de Brillouin.

Para poder calcular la energía correspondiente a este arreglo, recordemos que las redes no son únicas y hay una gran variedad de ellas, así que nos enfocaremos en la red de Bravais del tipo triangular [32] y cuadrada, como ya se ha hecho notar en los capítulos anteriores. Dividamos a los átomos de la red hexagonal en dos grupos de tal forma que no queden dos miembros de un grupo como vecinos cercanos. Ahora, fijemos el eje de coordenadas en el centro del hexágono de lados de longitud a y definamos los vectores unitarios $\vec{c} = a/2(3, -\sqrt{3})$ y $\vec{b} = a/2(3, \sqrt{3})$, como se muestra en la Figura 3.9 - a). De

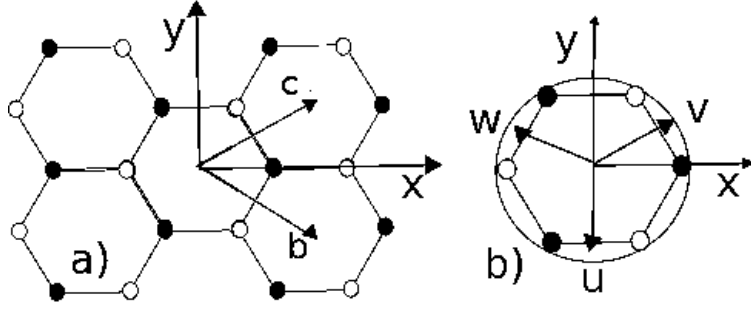


Figura 3.9: Celda hexagonal figura a), los círculos llenos forman una red de Bravais triangular, de igual forma los círculos vacíos, los vectores \vec{c} y \vec{b} van del centro del hexágono al centro del otro hexágono. La figura b) se forma de tomar las coordenadas triangulares.

esta forma, cualquier punto en la red está dado por los vectores primitivos,

$$\begin{aligned}\vec{U}_{rs} &= \vec{U}_{00} + r\vec{c} + s\vec{b} = \frac{l}{2} (3r + 3s - 1, \sqrt{3}(s - r - 1)), \\ \vec{V}_{rs} &= \vec{V}_{00} + r\vec{c} + s\vec{b} = \frac{l}{2} (3r + 3s + 1, \sqrt{3}(s - r - 1)),\end{aligned}\quad (3.19)$$

donde $r, s \in \mathbb{Z}$. Con estos vectores primitivos podemos construir la red recíproca. Como la red es 2 dimensional, basta encontrar un par de vectores que cumplan la condición,

$$\vec{U}_i \cdot \vec{V}_j = \delta_{i,j}. \quad (3.20)$$

Llamemos estos vectores recíprocos \vec{A} y \vec{B} , los cuales tiene la siguiente forma

$$\vec{A} = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}), \quad \vec{B} = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}). \quad (3.21)$$

Con estos resultados, procedemos a definir coordenadas triangulares u, v, w ², tomando los nuevos ejes como se muestra en la Figura 3.9 - b) de tal forma que cumpla con la propiedad,

$$u + v + w = 0. \quad (3.22)$$

El radio que inscribe nuestro hexágono es $r = \sqrt{x^2 + y^2} = (a\sqrt{3}/2)$. Haciendo el siguiente cambio de coordenadas $u = -y$ y $v - w = \sqrt{3}x$, podemos escribir la ecuación de Schrödinger,

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + k^2 \right) \psi(x, y) = 0, \quad k^2 = \frac{2m\epsilon}{\hbar^2}, \quad (3.23)$$

en términos de las coordenadas triangulares como,

$$\left(3 \frac{\partial^2}{\partial (v-w)^2} + \frac{\partial^2}{\partial u^2} + k^2 \right) \psi(u, v, w) = 0. \quad (3.24)$$

²La suma se debe entender en el sentido vectorial. Sin embargo, una vez fijo el lado del hexágono, las operaciones entre las componentes son escalares.

En nuestro nuevo sistema de coordenadas triangulares, el parámetro k cambia su forma. Originalmente está en coordenadas cartesianas $k^2 = k_x^2 + k_y^2$ y en el nuevo sistema hay 3 componentes triangulares que deben cumplir con la ecuación $k_1 + k_2 + k_3 = 0$, de acuerdo a la Ec.(3.22). De esta forma, tenemos que k^2 en coordenadas cartesianas, se escribe en términos de las componentes triangulares como:

$$k^2 = \frac{2(k_1 + k_2 + k_3)}{3} = \frac{4(k_1 + k_2 + k_1 k_1)}{3}. \quad (3.25)$$

Al resolver la ecuación de Schrödinger en coordenadas triangulares, la función de onda toma la siguiente forma [33],

$$\begin{aligned} \psi(u, v, w) = & \left(\cos(k_1 u) + C \sin(k_1 u) \right) \left(\cos\left(\frac{(k_2 - k_3)(v - w)}{3}\right) + \right. \\ & \left. + D \sin\left(\frac{(k_2 - k_3)(v - w)}{3}\right) \right) + \left(\cos(k_2 u) + \right. \\ & \left. + C \sin(k_2 u) \right) \left(\cos\left(\frac{(k_2 - k_1)(v - w)}{3}\right) + D \sin\left(\frac{(k_3 - k_1)(v - w)}{3}\right) \right) + \\ & \left(\cos(k_3 u) + C \sin(k_3 u) \right) \left(\cos\left(\frac{(k_1 - k_2)(v - w)}{3}\right) + \right. \\ & \left. + D \sin\left(\frac{(k_1 - k_2)(v - w)}{3}\right) \right). \end{aligned} \quad (3.26)$$

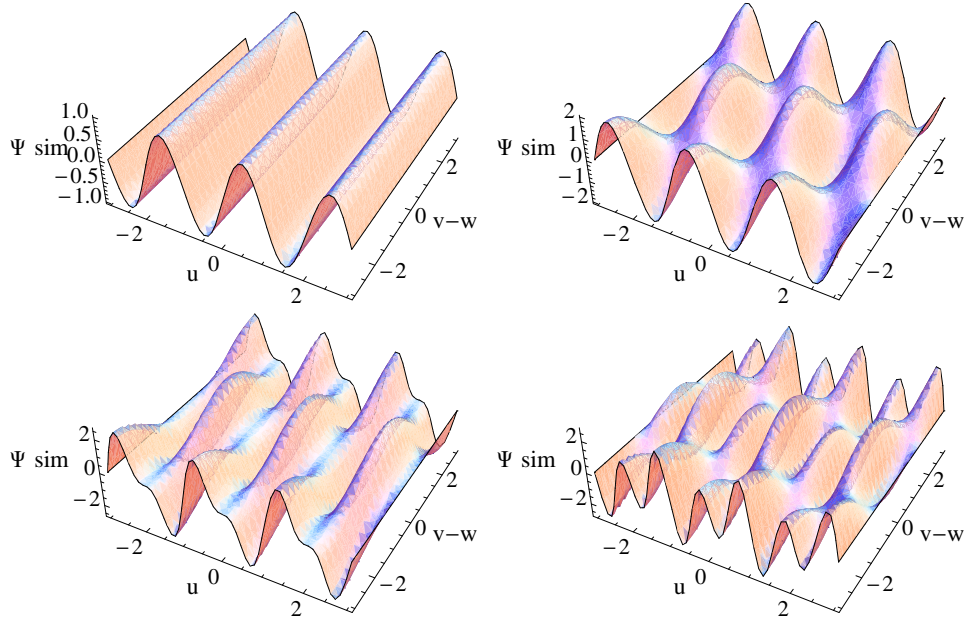


Figura 3.10: Comportamiento de la función de onda simétrica para $(n_1, n_2, n_3) = (0, 0, 1), (0, 1, 1), (1, 1, 2)$ y $(1, 2, 2)$.

En esta función de onda se pueden encontrar los modos simétricos y antisimétricos, con respecto a la amplitud. De esta forma obtenemos dos funciones de onda, una

antisimétrica

$$\begin{aligned}\psi_{antisim} &= \sin\left(\frac{\pi n_1 u}{r}\right) \sin\left(\frac{\pi(n_2 - n_1)(v - w)}{3r}\right) \\ &+ \sin\left(\frac{\pi n_2 u}{r}\right) \sin\left(\frac{\pi(n_3 - n_1)(v - w)}{3r}\right) \\ &+ \sin\left(\frac{\pi n_3 u}{r}\right) \sin\left(\frac{\pi(n_1 - n_2)(v - w)}{3r}\right),\end{aligned}\quad (3.27)$$

y una simétrica,

$$\begin{aligned}\psi_{sim} &= \sin\left(\frac{\pi n_1 u}{r}\right) \cos\left(\frac{\pi(n_2 - n_1)(v - w)}{3r}\right) \\ &+ \sin\left(\frac{\pi n_2 u}{r}\right) \cos\left(\frac{\pi(n_3 - n_1)(v - w)}{3r}\right) \\ &+ \sin\left(\frac{\pi n_3 u}{r}\right) \cos\left(\frac{\pi(n_1 - n_2)(v - w)}{3r}\right).\end{aligned}\quad (3.28)$$

El comportamiento de la función de onda simétrica, en los primeros niveles, se muestra en la Figura 3.10. El valor de las componentes triangulares k_1, k_2, k_3 es,

$$k_i = \frac{\pi n_i}{r} = \frac{2\pi n_i}{\sqrt{3}a}.\quad (3.29)$$

Sustituyendo en k^2 obtenemos

$$k_{n_1, n_2, n_3}^2 = \frac{8\pi^2}{9a^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2).\quad (3.30)$$

Hasta el momento hemos mostrado la función de onda de la red hexagonal, pero ¿qué hay del comportamiento de los átomos en esta red? Como ya mencionamos con anterioridad, la relación de dispersión para este arreglo cristalino tiene una forma relativista. Para ilustrar este hecho, estudiemos las vibraciones en el plano del cristal. Tomemos la segunda derivada con respecto al tiempo de los vectores primitivos de la red cristalina, las cuales toman la forma,

$$\begin{aligned}\frac{d^2 \vec{U}_{rs}}{dt^2} &= -\Omega \left(3\vec{U}_{rs} - \vec{V}_{rs} - \vec{V}_{r,s-1} - \vec{V}_{r-1,s} \right), \\ \frac{d^2 \vec{V}_{rs}}{dt^2} &= -\Omega \left(3\vec{V}_{rs} - \vec{U}_{rs} - \vec{U}_{r,s-1} - \vec{U}_{r-1,s} \right),\end{aligned}\quad (3.31)$$

donde Ω es la frecuencia de oscilación característica. Queremos soluciones del tipo de onda plana, así que la solución de los vectores primitivos deben de tener la forma,

$$U_{rs} = U e^{i(\vec{k} \cdot \vec{U}_{rs} - \omega t)}, \quad V_{rs} = V e^{i(\vec{k} \cdot \vec{V}_{rs} - \omega t)}.\quad (3.32)$$

Al sustituir estas expresiones, tenemos que las oscilaciones en el plano se escriben como

$$\begin{aligned}U_{rs} \omega^2 &= \Omega^2 \left(3U - V e^{ik_x a} - 2V e^{-ik_x a/2} \cos(k_y a \sqrt{3}/2) \right), \\ U_{rs} \omega^2 &= \Omega^2 \left(3V - U e^{-ik_x a} - 2U e^{ik_x a/2} \cos(k_y a \sqrt{3}/2) \right).\end{aligned}\quad (3.33)$$

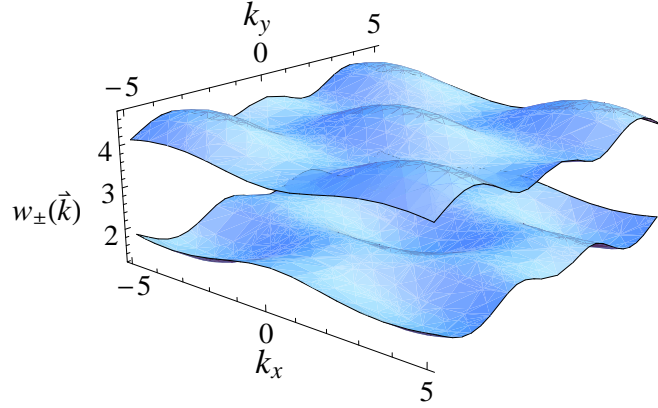


Figura 3.11: Vibraciones de los electrones en el plano.

Este sistema de ecuaciones está acoplado y lo podemos escribir en forma matricial,

$$\frac{w^2}{\Omega^2} \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & -\Lambda \\ -\Lambda^* & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix}, \quad (3.34)$$

donde $\Lambda = e^{ik_x a} + 2e^{-ik_x a/2} \cos(k_y a \sqrt{3}/2)$. Así, tenemos un problema de valores propios y la solución para w es,

$$w_{\pm} = \Omega \left(3 \pm \sqrt{1 + 4C_x C_y + C_y^2} \right). \quad (3.35)$$

Aquí $C_x = \cos(k_x a \sqrt{3}/2)$ y $C_y = \cos(k_y a \sqrt{3}/2)$. Las vibraciones correspondientes se muestran en la Figura 3.11. Estas vibraciones cuentan con una apariencia de una doble sábana periódica, en las cuales se observa la aparición de los conos de Dirac en la vecindad de los puntos mínimos, que muestran que las vibraciones poseen un comportamiento relativista. En el límite donde las k_i 's son pequeñas, vemos que la razón w^2/Ω^2 se aproxima a,

$$\frac{w^2}{\Omega^2} \simeq \frac{3a^2}{4} (k_x^2 + k_y^2) = \frac{3a^2 k^2}{4} \Rightarrow w \propto \vec{k}. \quad (3.36)$$

Esta es una visión alternativa al espectro de energía que hemos visto en la aproximación de amarre fuerte. En lo que sigue, veremos algunas analogías de este sistema con otros de materia condensada.

3.3. Cadena Lineal Corrugada

En esta sección trataremos el tema de la cadena lineal corrugada. Antes de iniciar, retomaremos la cadena lineal con un punto de vista ligeramente distinto. Tomemos una red de una dimensión (1D) formada por átomos espaciados de igual forma a lo largo del eje \hat{x} , un sistema descrito por la ecuación de Schrödinger dependiente del

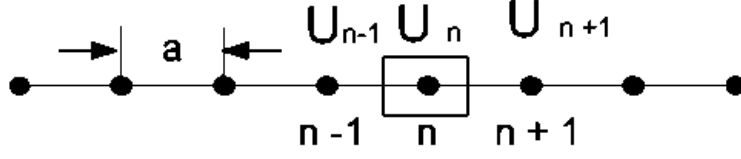


Figura 3.12: Cadena lineal unidimensional.

tiempo y los estados estacionarios de la ecuación de Schrödinger $(H - E_n)\psi = 0$, donde los eigenvalores E_n dan la energía de un sólo átomo. Tomemos nuestra celda primitiva de tal forma que sólo contenga un átomo y la etiquetemos con el entero n , como se muestra en la Figura 3.12. Recordando los resultados de la sección 2,2,2, el electrón queda descrito por la amplitud compleja u_n de tal forma que $p_n = |u_n|^2$, el cual da la probabilidad de encontrar al electrón en el sitio n respectivamente. En nuestra aproximación, estas amplitudes satisfacen la ecuación,

$$i \frac{d}{dt} u_n = -t(u_{n-1} + u_{n+1}), \quad (3.37)$$

el cual es el análogo del modelo de amarre fuerte a la ecuación de Schrödinger. Para simplificar la notación, tomemos $t = 1$. Con estas unidades podemos escribir la ecuación anterior como,

$$i \frac{d}{dt} u_n = H u_n \equiv -(u_{n-1} + u_{n+1}), \quad (3.38)$$

donde el espectro de energía de un sólo electrón se encuentra de forma directa y tiene la siguiente forma,

$$H u_n = E u_n = -(u_{n-1} + u_{n+1}), \quad (3.39)$$

el cual es el análogo al problema de eigenvalores original. Usando el teorema de Bloch

$$u_{n+1} = \hat{T} u_n, \quad (3.40)$$

las eigenfunciones del Hamiltoniano se pueden encontrar resolviendo el problema de eigenvalores para el operador de traslación y tomando en cuenta el efecto del campo magnético,

$$\hat{T} u_n = e^{i\gamma} \hat{T} u_n = e^{i\gamma} \lambda u_n, \quad (3.41)$$

siendo γ la integral dada por,

$$\gamma = \left(e \int_r^{r+L} A \cdot dl \right) = 2\pi\alpha.$$

Con nuestro nuevo sistema de eigenfunciones, necesitamos condiciones de frontera. Siguiendo un procedimiento estándar, reemplazamos la red infinita por una cadena de longitud finita ($0 \leq n \leq N$) y aplicando condiciones de frontera periódicas obtenemos,

$$u_N = e^{i2\pi\alpha N} \hat{T}^N u_0 = e^{i2\pi\alpha N} \lambda^N u_0 = e^{i2\pi\alpha N} u_0, \quad (3.42)$$

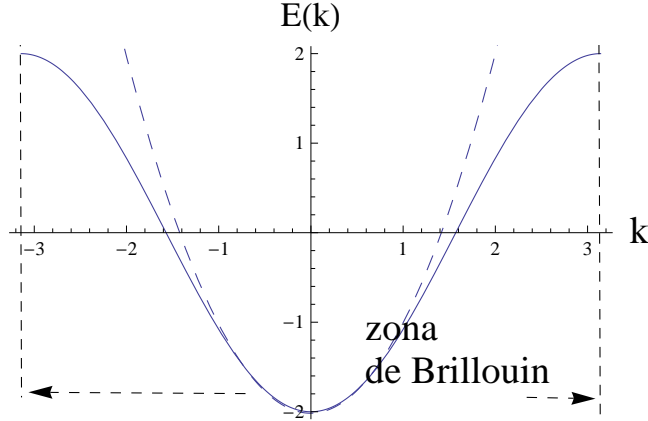


Figura 3.13: Espectro del electrón en una red unidimensional. La curva punteada es la aproximación de onda grande a este espectro.

esto es, la ecuación algebraica $\lambda^N = 1$ debe de ser satisfecha. Claramente se observa que los eigenvalores son complejos y satisfacen,

$$\lambda_m = \lambda_m = e^{ik} \quad \text{con} \quad k = \frac{2\pi}{N} m \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots). \quad (3.43)$$

Por simplicidad, no pusimos un índice en la variable k , la cual es una variable discreta con una distancia pequeña $\delta k = 2\pi/N$ entre los valores vecinos y puede ser usada para enumerar los eigenvalores en vez de un entero m . También es el vector de onda (o cuasi-momento) del electrón. Las eigenfunciones del operador de traslación pueden ser construidas por medio del mismo operador \hat{T} , usando la ecuación de valores propios N veces obtenemos,

$$u_n = e^{i2\pi\alpha n} \hat{T}^n u_0 = e^{i2\pi\alpha n} \lambda^n u_0 = e^{i2\pi\alpha n} e^{ikn} u_0. \quad (3.44)$$

Las eigenfunciones del operador \hat{T} son,

$$u_n = e^{i2\pi\alpha n} e^{ikn}. \quad (3.45)$$

Con estos calculos, podemos obtener el espectro de energías de forma directa. Sustituyendo las eigenfunciones directamente en la Ec.(3.39), obtenemos la siguiente energía del electrón,

$$E = \epsilon(k) = -(e^{-ik-i2\pi\alpha} + e^{ik+i2\pi\alpha}) = -2 \cos(k + 2\pi\alpha). \quad (3.46)$$

El espectro del electrón para una red 1D se muestra en la Figura 3.13. Es el espectro de energía en el modelo de amarre fuerte, el cual, es una función periódica del cuasi-momento k , como ocurre en cualquier red periódica. Esta figura se muestra en el intervalo $k \approx (-\pi, \pi)$, conocida como la primera zona de Brillouin.

Para ilustrar nuestro espectro de energía para el grafeno, modificaremos la red 1D llevándola a una forma corrugada, como se muestra en la Figura 3.14. Esta red modificada difiere de la anterior en varios aspectos: los átomos indicados con círculos abiertos

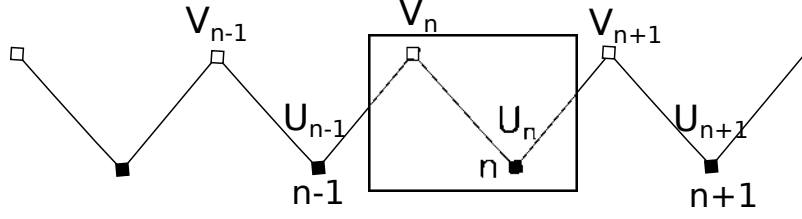


Figura 3.14: red corrugada de 1D.

están recorridos con respecto a los otros indicados con círculos llenos. La nueva red contiene dos átomos en la celda primitiva. Asumimos que la amplitud de tunelaje a lo largo de los bordes inclinados son iguales para ambos lados, de modo que tenemos un problema similar al anterior pero con diferente notación u_n para los círculos llenos y v_n para los círculos abiertos. Con esto, la ecuación de Schrödinger se reemplaza por dos ecuaciones acopladas,

$$i\frac{\partial}{\partial t}u_n = -(v_{n-1} + v_n), \quad i\frac{\partial}{\partial t}v_n = -(u_{n-1} + u_n). \quad (3.47)$$

En nuestra red corrugada, la celda primitiva es dos veces más larga y tiene dos átomos, por lo que ya no es invariante bajo la acción del operador de traslación \hat{T} , pero es invariante bajo el traslado de dos átomos bajo la acción de un nuevo operador $\hat{T}_2 = \hat{T}^2$, definido de forma tal que,

$$\hat{T}_2 u_n = u_{n+1}, \quad \hat{T}_2 v_n = v_{n+1}. \quad (3.48)$$

Por simplicidad, introducimos una función de onda de dos componentes para las amplitudes del electrón:

$$\psi_n = \begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix}. \quad (3.49)$$

Usando una nueva notación para los operadores que se representan mediante las matrices 2×2 ,

$$\hat{\tau} \psi_n = \psi_{n+1}, \quad \hat{\tau} = \begin{pmatrix} \hat{T}_2 & 0 \\ 0 & \hat{T}_2 \end{pmatrix}, \quad (3.50)$$

las ecuaciones acopladas se pueden representar como una ecuación de Schrödinger con un Hamiltoniano matricial,

$$\mathcal{H} = - \begin{pmatrix} 0 & 1 + \hat{T}_2^{-1} \\ 1 + \hat{T}_2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.51)$$

Sus eigenfunciones se obtienen resolviendo el problema de eigenvalores para $\hat{\tau}_2$, al usar las condiciones de frontera modificadas $u_{N/2} = u_0$, $v_{N/2} = v_0$. Usando la definición de k anterior, obtenemos los eigenvalores de los nuevos operadores de traslación $\lambda_m = \lambda_k = \exp(2ik)$ y sus eigenfunciones:

$$\psi_n = e^{2ikn} \psi = e^{2ikn} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}. \quad (3.52)$$

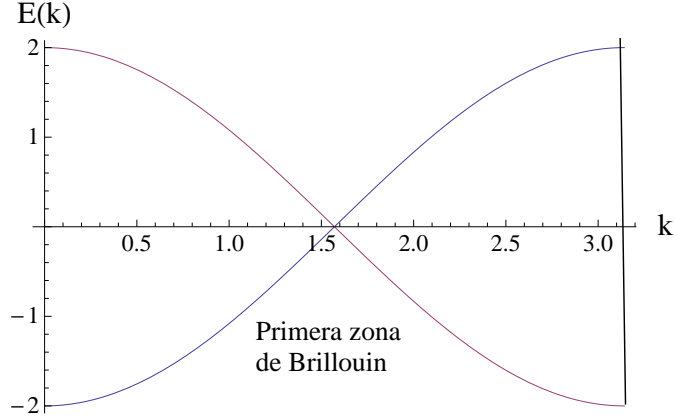


Figura 3.15: Espectro del electrón para una red corrugada de 1D.

Estos eigenvalores no resuelven el problema del espectro, porque el operador \hat{T}_2 de traslación contiene la mitad de todos los eigenvalores que puede poseer \hat{T} y en consecuencia los eigenvalores encontrados contienen dos constantes sin determinar (u, v) . Sustituyendo estas eigenfunciones en la ecuación secular original $(H - E_n)\psi = 0$, obtenemos dos ecuaciones algebraicas,

$$\begin{aligned} Eu &= -(e^{-2ik} + 1)v = -e^{-ik}2 \cos(k)v, \\ Ev &= -(1 + e^{2ik})u = -e^{ik}2 \cos(k)u. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Estas ecuaciones pueden ser acopladas y se resuelven de forma simple. Despejamos u de la primera y sustituyendo en la segunda, obtenemos la relación de dispersión,

$$E^2 = (2 \cos(k))^2 = \epsilon(k), \quad (3.54)$$

así, el espectro, se convierte en:

$$E = E_{\pm} = \pm \epsilon(k), \quad (3.55)$$

el cual se muestra en la Figura 3.15. Este espectro es similar al de la red 1D considerada anteriormente, pero con una interpretación diferente. La parte izquierda del espectro de la red simple se traslada a la derecha por el vector más pequeño de la red recíproca de la red corrugada para encajar en la zona de Brillouin, la cual es más pequeña por un factor de dos. Hay dos ramas del espectro porque hay dos niveles de un sólo átomo en la celda primitiva, las cuales son posibles sólo para ramas con propiedades diferentes de simetría.

En la Figura 3.14 podemos encontrar una operación de simetría más, bajo la cual la red corrugada es invariante. Esta es la traslación de la red media distancia de la celda unitaria (una unidad de \hat{T}), seguida por una reflexión en la dirección transversa ($u \rightarrow v$ y $v \rightarrow u$). Esta operación combinada puede ser representada por el operador,

$$\hat{\mathcal{K}} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{T}^{-1} \\ \hat{T} & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.56)$$

donde \hat{T} se define como:

$$\hat{T}u_n = u_{n+1/2}, \quad \hat{T}v_n = v_{n+1/2}. \quad (3.57)$$

De esto se sigue que $\hat{T}^2 = \hat{T}_2$ y $\exp(ik)$ son los eigenvalores del operador \hat{T} que corresponden a las eigenfunciones de la Ec.(3.52). Un cálculo directo confirma que el operador \hat{K} conmuta con el Hamiltoniano (3.51) y consecuentemente la ecuación,

$$\hat{K}\psi = k\psi, \quad (3.58)$$

se puede usar para clasificar las ramas del espectro del electrón. Los eigenvalores y los correspondientes eigenfunciones son,

$$k_+ = 1, \quad \psi_n^{(+)} = e^{2ikn} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{ik} \end{pmatrix}, \quad (3.59)$$

$$k_- = -1, \quad \psi_n^{(-)} = e^{2ikn} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-ik} \end{pmatrix}. \quad (3.60)$$

Si sustituimos estas ecuaciones en la Ec.(3.53), encontramos que el signo de la energía, en la Ec.(3.55) coincide con el signo de los eigenvalores k_{\pm} . Ahora podemos ver que las dos ramas del espectro de energía en la Figura 3.15 se diferencian por un nuevo número cuántico k . Consecuentemente, tienen diferente simetría y su cruce no contradice la mecánica cuántica. Para la red 2D del grafeno, este número cuántico es conocido como quiralidad.

3.3.1. Equivalencia de la Red Cuadrada y la Hexagonal

En nuestro análisis de la red hexagonal que hemos realizado hasta ahora, solamente falta añadir un elemento más, que es la equivalencia entre la conocida red cuadrada y la red hexagonal y así mostrar el comportamiento de la energía como función del flujo magnético, la mariposa de Dirac-Hofstadter. Comencemos con la red cuadrada es un arreglo de átomos, colocados a una distancia periódica a , en ambas coordenadas, formando un conjunto de cuadrados acomodados en forma de red, como en la Figura 3.16 - a). La red hexagonal es un arreglo de átomos con forma de panal de abeja, es decir, la celda unitaria tiene forma hexagonal con una distancia entre los átomos de b , como en la Figura 3.16 - b). Con esta breve descripción de cada red, podemos ver su equivalencia. Primero, en cada red podemos encontrar una celda unitaria que contiene un sólo átomo. Cambiando esta propiedad para la red hexagonal, procedemos a tomar una nueva celda unitaria. Sea la nueva celda de tal forma que contenga dos átomos, como se muestra en la Figura 3.17, estos átomos deben ser vecinos cercanos y estar entre el plano formado por los eje del hexágono de tal forma que cubra toda la red, formando una nueva red por los eje del hexágono de tal forma que cubra toda la red, formando una nueva red como se muestra en la Figura 3.17. A la red cuadrada procedemos a inclinarla de tal forma que tome la forma de un paralelogramo. Finalmente procedemos a sobreponer las red y observamos que ellas son equivalentes dentro de la nueva celda unitaria de la red hexagonal, como se muestra en la Figura 3.18. Con la equivalencia de ambas redes podemos ver que el comportamiento del espectro de energía de la red hexagonal tiene un comportamiento similar al espectro de energía de la red cuadrada, con la diferencia de las celdas unitarias en cada red son diferentes: Para la red hexagonal hay dos átomos, haciendo que este espectro cuente con más

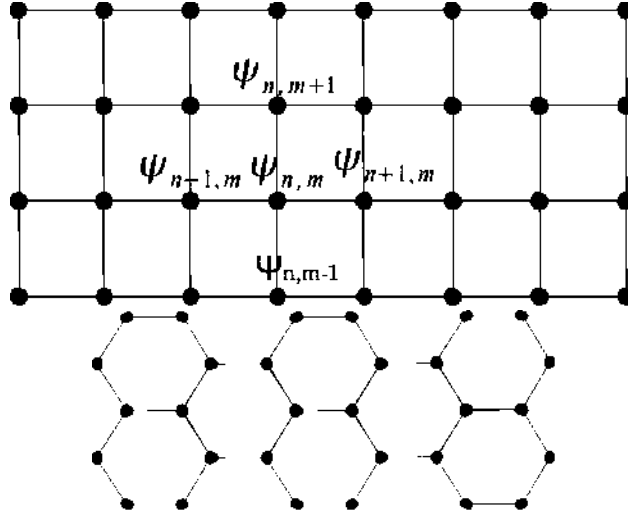


Figura 3.16: Representación de la red a) cuadrada y b) hexagonal.

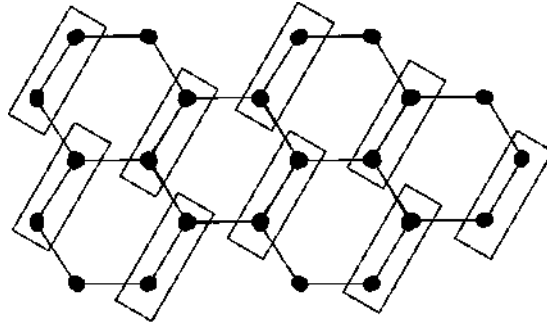


Figura 3.17: red hexagonal con una nueva celda unitaria, la cuál contiene dos átomos.

ramas y la mitad de eigenvalores por cada eigenfunción. De esta forma, los espectros de energía de las red son diferentes.

Hasta el momento, hemos realizado un análisis gráfico de la equivalencia de las redes. A continuación, mostraremos esta equivalencia usando el cálculo de la energía por medio de la aproximación a amarre fuerte. Comenzaremos tomando la nueva celda unitaria de dos átomos en la red hexagonal y etiquetaremos los átomos con $\psi_{n,m}$ y $\phi_{n,m}$ respectivamente. Enseguida, tomemos las interacciones con los vecinos cercanos de acuerdo con la Figura 3.19 y escribimos el Hamiltoniano correspondiente.

$$\begin{aligned} -t(\phi_{n+1,m-1} + \phi_{n+1,m+1} + t'\phi_{n,m}) &= E\psi_{n,m}, \\ -t(\psi_{n-1,m+1} + \psi_{n-1,m-1} + t'\psi_{n,m}) &= E\phi_{n,m}. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Notemos que hay un traslape en el eje \hat{y} , con respecto a los ejes de referencia. Pa-

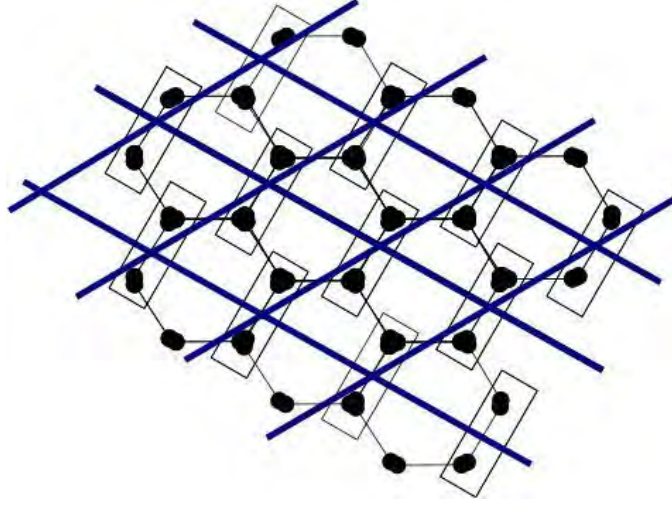


Figura 3.18: Comparación de la red cuadrada con la nueva representación de la red hexagonal.

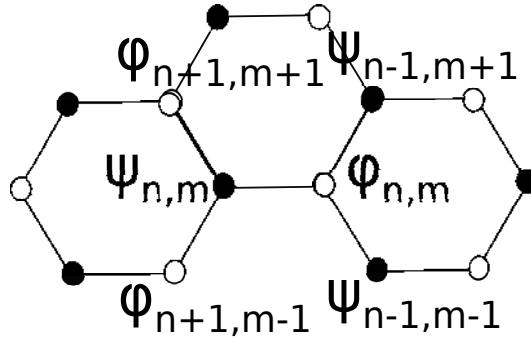


Figura 3.19: Configuración del modelo del amarre fuerte para la red hexagonal con celda unitaria de dos átomos.

ra solucionar este problema, multiplicamos con t' a las funciones $\psi_{n,m}$ y $\phi_{n,m}$ para indicarlo. Tomando el campo magnético en la norma de Landau, $\vec{A} = (By, 0, 0)$, y tomando $t = 1$, obtenemos el sistema de ecuaciones con el campo magnético,

$$\begin{aligned} -(\phi_{n+1,m-1} + \phi_{n+1,m+1} + t'e^{-i\pi xm}\phi_{n,m}) &= E\psi_{n,m}, \\ -(\psi_{n-1,m+1} + \psi_{n-1,m-1} + t'e^{-i\pi xm}\psi_{n,m}) &= E\phi_{n,m}. \end{aligned} \quad (3.62)$$

La equivalencia entre la red cuadrada de un átomo y la red hexagonal de dos átomos podemos obtenerla si tomamos la Ec.(3.61) y realizamos dos operaciones por separado. La primera, una suma,

$$\begin{aligned} -\phi_{n+1,m-1} - \phi_{n+1,m+1} - \psi_{n-1,m+1} - \psi_{n-1,m-1} &= \\ = (E + t')(\psi_{n,m} + \phi_{n,m}), \end{aligned} \quad (3.63)$$

la otra operación que podemos realizar es la resta,

$$\begin{aligned} -\phi_{n+1,m-1} - \phi_{n+1,m+1} + \psi_{n-1,m+1} + \psi_{n-1,m-1} &= \\ &= (E - t')(\psi_{n,m} - \phi_{n,m}). \end{aligned} \quad (3.64)$$

Con este sistema de ecuaciones podemos obtener la energía final para la red hexagonal de dos átomos, la cual consta de dos ramas de energía, la primera es llamada “bonding” (correspondiente a la suma), en la cual la propiedad a tomar en cuenta es $\psi_{n,m} = \phi_{n,m}$ y la segunda es llamada “antibonding” (correspondiente a la resta) se tomará $\psi_{n,m} = -\phi_{n,m}$. Comenzaremos con los cálculos del bonding. La ecuación de la suma se reduce a,

$$-\phi_{n+1,m-1} - \phi_{n+1,m+1} - \phi_{n-1,m+1} - \phi_{n-1,m-1} = 2(E + t')\phi_{n,m}. \quad (3.65)$$

Usamos ahora el teorema de Bloch 2 dimensional

$$\psi = \phi = e^{ik_1 n} e^{ik_2 m} U(\vec{k}), \quad (3.66)$$

la energía es entonces,

$$E = -t' - (\cos(k_1) + \cos(k_2)). \quad (3.67)$$

Un razonamiento análogo para el antibonding, nos conduce a,

$$-\phi_{n+1,m-1} - \phi_{n+1,m+1} + \phi_{n-1,m+1} + \phi_{n-1,m-1} = -2(E - t')\phi_{n,m}, \quad (3.68)$$

y finalmente la energía es,

$$E = t' - (\cos(k_1) + \cos(k_2)). \quad (3.69)$$

Ambas soluciones de la energía se muestran en la Figura 3.20, donde la forma de estas

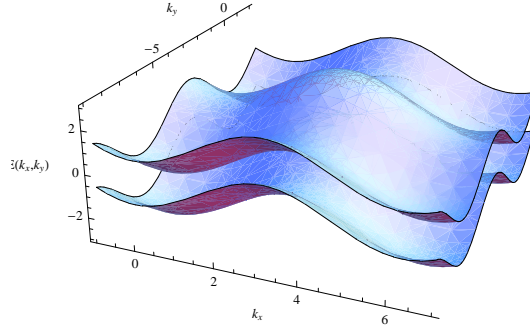


Figura 3.20: Gráfica de las energías del bonding y antibonding.

energías encontradas es igual a la energía de la red cuadrada [30] y es sólo la mitad, de acuerdo con la Ec.(2.50). De esta forma vemos que la suma de las dos ramas es igual o equivalente a la energía encontrada en la red cuadrada con una celda unitaria de un sólo átomo. En la siguiente sección hablaremos del problema de Hofstadter para la red hexagonal.

3.4. Mariposa de Hofstadter-Dirac

Ahora estudiaremos el problema de Hofstadter, para una red hexagonal en vez de usar la red cuadrada original. Por los demás, los parámetros como la orientación del campo magnético, la norma de Landau, etc. se mantienen de la misma forma, de modo que aprovechamos los cálculos y el análisis ya realizados en las secciones anteriores.

Nuevamente observamos que tenemos un problema de magnético Bloch Como mencionamos anteriormente, el efecto del campo magnético en la red hexagonal es igual al ocurrido en la red cuadrada. Entonces, obtenemos las ecuaciones acopladas de Harper correspondientes a la red hexagonal,

$$\begin{aligned} -\phi_{n+1,m-1} - \phi_{n+1,m+1} - t e^{-i\pi\Phi_m} \phi_{n,m} &= E \psi_{n,m}, \\ -\psi_{n-1,m+1} - \psi_{n-1,m-1} - t e^{i\pi\Phi_m} \psi_{n,m} &= E \phi_{n,m}, \end{aligned} \quad (3.70)$$

donde el término $2\pi\Phi$ es el flujo magnético a través de un hexágono unitario. La solución de estas ecuaciones ya se ha dado en la sección anterior y sólo afecta a los términos que contienen la etiqueta m . Después de unas manipulaciones algebraicas obtenemos la energía para el bonding y antibonding respectivamente son,

$$\begin{aligned} E &= -t' - (\cos(k_1) + \cos(k_2 + \pi\Phi_m)), \\ E &= t' - (\cos(k_1) + \cos(k_2 + \pi\Phi_m)), \end{aligned} \quad (3.71)$$

donde k_i con $i = 1, 2$ es el vector de onda del electrón, t es el parámetro de salto de un punto en la red a otro. La cantidad $\Phi = p/q$ especifica el cociente entre el período del potencial y el período correspondiente a acoplamiento a primeros vecinos. La energía aquí mostrada cuenta con dos formas a diferencia de la original, ocasionando que el espectro de la energía se duplique en la misma área, es decir se vea reflejado obteniendo un doble espectro como el obtenido en la red cuadrada. Cada ecuación de Harper se encuentran formada por q bandas, donde cerca de cualquier número racional encontramos un q arbitrariamente grande al igual que números irracionales con $q \rightarrow \infty$. Consecuentemente se pueden encontrar espectros como función de Φ que posee un número arbitrario de bandas en la vecindad de espectros que poseen un número finito. De esta forma, la diferencia entre números racionales e irracionales se hace evidente en un fenómeno físico para cada ecuación. Esta discusión parte de suponer que la sustitución de Peierls es válida debido al campo magnético débil. Para estudiar este sistema para el régimen de campos magnéticos intenso seguimos un procedimiento similar a la red cuadrada infinita, para cada ecuación de Harper obtenida los niveles de Landau se rompen en sub-bandas y si el campo magnético es lo suficientemente intenso, la separación entre los niveles de Landau es lo suficientemente grande para que el acoplamiento entre las sub-bandas de dos niveles contiguos sea despreciable, pudiendo considerar los niveles por separado. Observemos que en el límite es posible encontrar una ecuación similar a (2.58) para cada energía, donde el flujo magnético Φ es sustituido por su inverso $\sigma = q/p$. Por otro lado, si el acoplamiento entre los niveles de Landau es débil, pero no despreciable se toman en cuenta sólo algunos niveles de Landau. Utilizando la forma más general del potencial periódico, podemos llegar a una relación de recurrencia tridiagonal para cada energía como

$$Q_m^- c_{m-1} + Q_m c_m + Q_m^+ c_{m+1} = [(\epsilon + Ek_2 + \sigma bEm)I_N + \sigma bED_N] c_m, \quad (3.72)$$

Esta expresión representa la ecuación de Harper generalizada que permite estudiar el espectro del problema eléctrico-magnético de Bloch bajo las condiciones más generales posibles. Aquí I_N es la matriz identidad, D_N es la matriz diagonal que corre de 0 a $N - 1$ y las matrices Q_m^-, Q_m, Q_m^+ dependen de \vec{k} , para ver la forma completa de las matrices ver la Ref. [31]. Esta es la ecuación de Harper generalizada. El espectro se encuentra, nuevamente, mediante la ecuación de eigenvalores,

$$H(k_1, k_2)b(k_1, k_2) = \epsilon^0(k_1, k_2)b(k_1, k_2), \quad (3.73)$$

donde $\epsilon^0(k_1, k_2)$ y $b(k_1, k_2)$ son los eigenvalores y eigenvectores de la energía y $H(k_1, k_2)$ es una matriz $pL \times pL$, donde L es el nivel de Landau más alto considerado en el cálculo y p es el denominador del inverso del flujo magnético $\sigma = q/p$.

El espectro puede encontrarse diagonalizando la matriz finita $H(k_1, k_2)$ para valores dados del flujo magnético. El caso que nos interesa, el acoplamiento entre los niveles de Landau es débil. Al diagonalizar esta matriz obtenemos los eigenvalores de la energía como función del inverso del flujo magnético correspondientes al espectro de la mariposa de Hofstadter-Dirac. Podemos ver que el espectro posee dos ejes de simetría en $\sigma = 1/2$ y en $E/|t| = 0$, además de aparecer dos mariposas una para $E > 0$ y la otra $E < 0$ y replicas de esta, formada por las cuatro alas en forma de equis para cada mariposa, se repiten reiteradamente al interior de la misma escalada por un factor dependiente de la energía y del flujo magnético. La mariposa de Hofstadter-Dirac cuenta con una estructura multifractal. Una característica del espectro de la maripo-

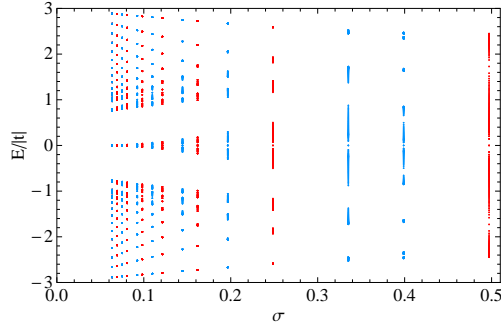


Figura 3.21: Bandas de energía de la red hexagonal, tomando a $\sigma = 1/q$ con q entero.

sa es que está compuesto por bandas. Encontramos un número total de $4p$ estados o sub-bandas, cada una conteniendo un número igual de estados. Para cada valor de σ se obtiene un número total de $4p$ bandas por cada nivel de Landau. En $\sigma = 1/2$ hay cuatro bandas simétricas en el intervalo $E/|t| \in [\sqrt{3}, \sqrt{6}]$ y en $E/|t| \in [0, \sqrt{3}]$, tocándose en $E/|t| = 0$ y $E/|t| = \pm\sqrt{3}$. Los niveles cerca de $E/|t| = 0$ y $E/|t| = 3$ se reconocen claramente como se muestra en la Figura 3.21. El espectro de energía se muestra en la Figura 3.22 es para $t = 1$. Nos dice que las energías permitidas son $-3|t| \leq E \leq 3|t|$ y el ancho de banda es $6t$. Cuando $\alpha = p/q$ (p y q primos relativos y enteros) el espectro comprende de q sub-bandas de Landau y por lo tanto el espectro tiene una compleja dependencia del campo magnético. Si $\Phi = p/q$, donde p y q son

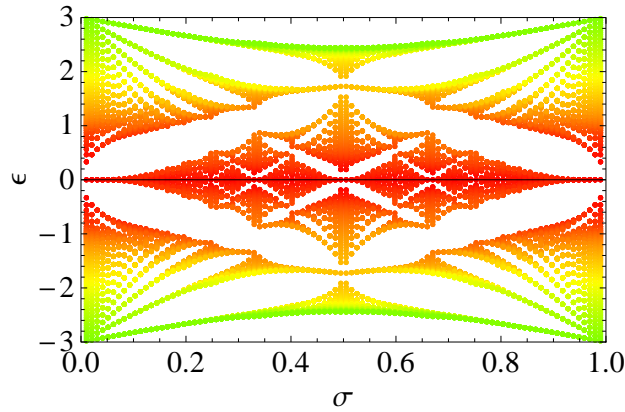


Figura 3.22: Espectro de energía de la red hexagonal.

primos enteros, la simetría de traslación de la red hexagonal en la dirección y se rompe, las Ec.(3.70) se convierten en ecuaciones periódicas, con periodo q en la dirección y , como consecuencia el espacio dual 2-dimensional se divide en q subespacios de bandas en la parte superior y en la parte inferior del espectro. Finalmente para el espectro

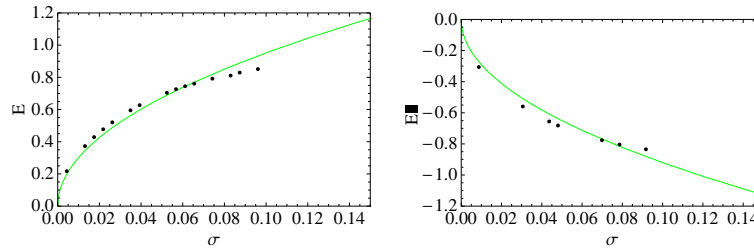


Figura 3.23: Ajuste de las primeras energías, hasta $\sigma = 0,2$ correspondiente al primer nivel de Landau.

de energía obtenido haremos un último análisis en la parte correspondiente al primer nivel de energía de Landau, recordando un poco en nuestro estudio anterior el grafeno cuenta con una estructura cristalina correspondiente a la hexagonal y obtubimos que el comportamiento de los electrones en esa red es gobernada por la ecuación de Dirac y no por la ecuación de Schrödinger como ocurre en la red cuadrada. Con esto en mente, podemos predecir que los electrones en este sistema formada por una red hexagonal y un campo magnético también es gobernado por la ecuación de Dirac teniendo con esto un comportamiento relativista. Como podemos ver en la Figura 3.23, un ajuste de los primeros puntos obtenidos del primer nivel de energía cerca de $E = 0$ es tal que

$$\frac{E}{|t|} = -2,91\sqrt{\sigma} \quad \text{y} \quad \frac{E}{|t|} = 3,01\sqrt{\sigma} \quad (3.74)$$

para la energía negativa y positiva. Con este resultado, podemos ver que la energía

tiene un comportamiento con forma de raíz y recordando las Ec.(3.5), podemos ver que corresponden a un comportamiento relativista. Por otro lado, a las energías más altas o bajas claramente corresponde a un crecimiento lineal correspondiente a un comportamiento no relativista y con esto vemos que una partícula tiene un comportamiento ultrarelativista con los niveles bajos de energía y un comportamiento no relativista para los niveles altos de energía; Aunque esta imagen es más intrincada debido a la dualidad de la ecuación de Harper.

3.5. La raíz cuadrada de una mariposa

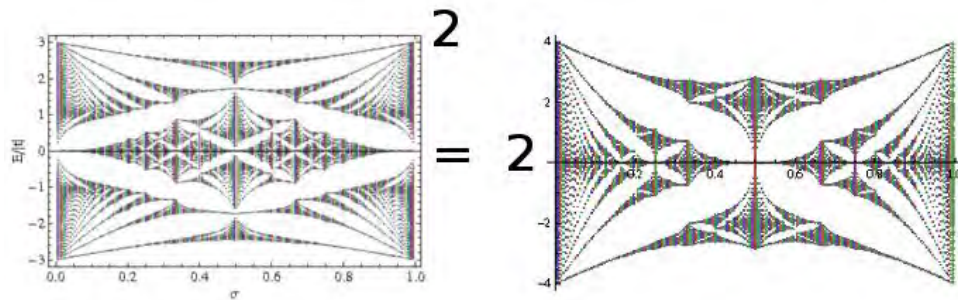


Figura 3.24: De espectro a espectro de energías.

En el estudio de la red hexagonal el espectro de energía resulta ser un doble espectro del correspondiente a la red cuadrada y para poder obtener cualquiera de estos espectros de energía recurrimos a la diagonalización del Hamiltoniano correspondiente. Esto nos lleva a preguntarnos si hay otra forma de diagonalizar tal Hamiltoniano, para responder recordamos la red hexagonal se resuelve mediante una ecuación tipo Dirac, de esta forma aprovechamos la forma en que se obtuvo la ecuación de Dirac en la física relativista en donde pasamos de una ecuación cuadrática de Schrödinger a un lineal de Klein-Gordon y al solucionarse el problema densidades negativas a una lineal de Dirac. Teniendo este proceder en mente, diagonalizamos el Hamiltoniano de la red hexagonal mediante un retocoso en el análisis de la ecuación de Dirac, es decir, elevamos al cuadrado el Hamiltoniano de la red Hexagonal,

$$H^2\psi = \epsilon\psi. \quad (3.75)$$

Este procedimiento lo realizamos mediante el desarrollo de Foldy-Wouthuysen y obtuvimos un espectro de energía idéntico al de la red cuadrada infinita. De esta forma encontramos una manera alternativa de diagonalizar el Hamiltoniano de la red hexagonal aprovechando las propiedades y restricciones usadas al encontrar la ecuación de Dirac. De esta forma damos una relación más entre las red hexagonal y cuadrada, permitiendo pasar de la mariposa de Dirac a la mariposa de Hofstadter mediante una simple operación al obtener la raíz cuadrada de la mariposa de Dirac.

Capítulo 4

Resumen y Conclusiones

Para concluir esta tesis, mencionaremos los resultados obtenidos de forma breve. El propósito principal de este trabajo es el estudio de la dinámica de los electrones planares en presencia de campos magnéticos externos. Clásicamente, sabemos que una partícula cargada inmersa en una región donde existe un campo magnético uniforme, describe trayectorias circulares alrededor de las líneas de campo. La frecuencia y el radio de la circunferencia descrita por cada electrón están completamente determinadas por su carga, su masa y la intensidad del campo aplicado.

Para el estudio de electrones en la mecánica cuántica no relativista y relativista, la influencia del campo externo sobre electrones que se mueven en un plano perpendicular a las líneas del campo, la influencia de éste se observa en las energías permitidas para los electrones.

- En el caso no relativista, los niveles de energía tienen un crecimiento proporcional al campo, $E_n \propto eB$, de modo que al graficar estas energías, el espectro se asemeja a un abanico abierto y es llamado abanico de Landau.
- En el caso cuántico relativista, realizamos el análisis correspondiente con la diferencia de que la función de onda es espinorial (ec. de Dirac). Así, el espectro se encuentra para las 2 componentes de la función de onda, que en ambos casos es $E_n \propto \sqrt{eB}$. El abanico de Landau en este caso se modifica como se muestra en la Fig. 1.2.

El caso de electrones moviéndose en una red cristalina bidimensional, utilizamos el teorema de Bloch, el cual se aplica a potenciales periódicos. Comenzamos estudiando la cadena lineal y la red cuadrada. Posteriormente tomamos en cuenta el campo magnético. Aquí observamos que:

- La aplicación del teorema de Bloch se hace en sistemas con potenciales periódicos. Este tipo de sistemas exhibe un espectro de energía en forma de bandas de energía permitidas, seguido de brechas energéticas prohibidas. Esta estructura de bandas permite analizar las propiedades de conducción de un material, es decir, nos permite saber si el material es conductor, aislante, semiconductor, etc.
- Para la cadena lineal, el teorema de Bloch nos permite establecer una equivalencia entre este sistema y otro formada por N osciladores armónicos desacoplados.

Para formar una cadena infinita, necesitamos cerrar la cadena en forma de un polígono. De esta forma, el espectro de energía toma una forma más simple y aparece una degeneración en los niveles de energía, tanta como el número de átomos presentes en la cadena. En presencia del campo magnético la degeneración comienza a romperse e incluso se observa un cruzamiento de bandas si hay un número suficientemente grande de átomos. Para campos débiles, podemos apreciar que los niveles de energía son proporcionales a la intensidad del campo, por lo que en este sistema encontramos el mismo comportamiento que exhiben los electrones no relativistas.

- Para el caso de una red cuadrada bidimensional sin campo magnético, vemos que el movimiento del electrón es gobernado por la ecuación de Schrödinger, al igual que la cadena lineal, solamente que la función de onda es bidimensional. De esta forma, el teorema de Bloch nos revela un espectro de energía en forma de sábana periódica. El efecto del campo es igual que en el caso de la cadena poligonal: En la norma de Landau, el espectro se ve afectado solamente en una dirección, se rompe la degeneración y las bandas de energía comienzan a cruzarse. Esto ocasiona que en ciertas regiones aparezcan bandas de energía permitidas y en otras bandas prohibidas, ocasionando que el espectro tome una forma peculiar, conocida como la mariposa de Hofstadter, el cual tiene propiedades de multifractalidad.

La parte final de la tesis aborda el tema de la red bidimensional hexagonal. Esta estructura cristalina es la base que tiene el grafeno, de modo que nos interesamos en conocer la influencia del campo magnético en este cristal y sus analogías con sistemas afines.

- Grafeno es uno de los materiales novedosos que posee propiedades tales que son importantes tanto para la ciencia de materiales como la ciencia básica. Esto se debe a que los grafinos, es decir, los portadores de carga del grafeno, son representados mediante funciones de onda ultrarelativistas sin masa. Esto es, el movimiento de los “electrones” del grafeno a bajas energías es gobernado por la ecuación de Dirac y la energía en presencia del campo es proporcional a la raíz del campo. El grafeno es excepcional por sus propiedades de dureza, conducción térmica, movilidad de sus portadores de carga, flexibilidad y otras que lo hacen atractivo como sucesor del silicio en aplicaciones nanotecnológicas.
- Concentrándonos más en la red hexagonal y haciendo uso del teorema de Bloch, encontramos el espectro de energías, el cual presenta dos soluciones debido a la naturaleza espinorial de la función de onda.
- Retomamos la cadena lineal infinita, pero considerando 2 átomos en cada celda unitaria, la función de onda ahora se vuelve matricial, promoviendo a que la ecuación de movimiento sea ahora la ecuación de Dirac. Esta cadena corrugada tiene la misma ecuación de onda que el grafeno. En este caso se observa la aparición de conos de Dirac.
- A continuación, visualizamos la celda unitaria de la red hexagonal tomando 2 átomos en ella. Así, obtenemos que este reacomodo de la red hexagonal es equivalente a una red cuadrada que duplica el espectro que encontramos con anterioridad.

- Considerando ahora la influencia del campo magnético en la red hexagonal, notamos un nuevo comportamiento fractal para la mariposa de Hofstadter-Dirac de una doble reproducción de la mariposa de Hofstadter, sin embargo, la posición de las energías permitidas permanecen sin alteración. Interesantemente, el espectro de amarre fuerte del cuadrado de la mariposa hexagonal nos arroja dos copias de la mariposa cuadrada. Entonces, decimos que la raíz cuadrada de la mariposa de la lattice cuadrada es la raíz de la lattice hexagonal. Esta es una observación original de esta tesis.

▪

Este trabajo de tesis puede extenderse de varias maneras, en particular se puede:

- Explorar la posibilidad estudiar los 2 átomos por celda unitaria como un sólo átomo compuesto.
- Estudiar la conexión entre la mariposa de Hofstadter-Dirac y el efecto Hall cuántico.
- Aumentar el número de átomos por celda unitaria.

entre otros. Con esto concluimos esta tesis y damos gracias por la atención dada en su lectura.

Apéndice A

Glosario de Cristalografía

Física del Estado Sólido: tiene que ver con las propiedades que resultan de la distribución de electrones en metales, aislantes y semiconductores. Generalmente, estas estructuras se encuentran en forma de cristales.

Cristal: Pueden ser ideales o no ideales. Un cristal ideal está construido de una repetición infinita de unidades estructurales idénticas en el espacio.

Unidad Estructural: Puede estar formado de un sólo átomo o un grupo de átomos y moléculas.

Estructura: La estructura de todos los cristales puede ser descrita en términos de una red (lattice), con un grupo de átomos adheridos a cada punto en la lattice.

Base: Es el grupo de átomos contenidos en las celdas unitarias de la red, cuando se repiten en el espacio forman una estructura cristalina.

Red (Lattice): Es un arreglo periódico de puntos en el espacio. Es una abstracción matemática. La estructura de todos los cristales puede describirse en términos de una red, con un grupo de átomos adjunto a cada punto de la red. Se define mediante tres vectores de traslación fundamentales $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ tales que el arreglo atómico se vea el mismo desde cualquier punto \vec{r} desde el que sea visto, de la misma forma que de otro

$$\vec{r}' = \vec{r} + u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3, \quad (\text{A.1})$$

donde u_1, u_2, u_3 son enteros arbitrarios. El conjunto de puntos pertenecientes a r' para toda u_i , con $i = 1, 2, 3$ definen una lattice.

Estructura Cristalina: Una estructura cristalina se define con la unión de una base y una red.

Red y Vectores de Traslación Primitivos: la red y los vectores de traslación $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ son primitivos si para cualquier dos puntos \vec{r} y \vec{r}' para los cuales el arreglo atómico se ve igual y siempre satisfagan la Ec.(A.1) con una elección apropiada de u_1, u_2 y u_3 .

Operador de Traslación: Se define como el desplazamiento de un cristal por un vector de traslación del cristal,

$$\vec{T} = u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3. \quad (\text{A.2})$$

Se llama vector de traslación de la red. Se puede tener más de una red para una estructura cristalina. También, es posible tener más de un conjunto de ejes para una red.

Identificación de la Base: Más de una red siempre es posible para una estructura dada y más de un conjunto de ejes es siempre posible para una red dada. De esta forma, la base se identifica una vez que estas opciones se han definido.

Operaciones de Simetría: En un cristal llevan a la estructura del cristal a ella misma. Estas incluyen las operaciones de traslación de la red. Por lo tanto hay operaciones de rotación y de traslación, llamadas operaciones puntuales y existen operaciones de operaciones combinadas.

Operaciones de Traslación en la Red: Son operaciones de simetría siempre y cuando el vector de traslación sea,

$$\vec{T} = u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3.$$

Operaciones Puntuales: Estas son las rotaciones y reflexiones, realizadas sobre un punto en la red, si es posible realizar operaciones de rotación y reflexión estas transforman al cristal en sí mismo.

Celda Punitiva: Es el paralelepípedo formado por los ejes primitivos a_1, a_1, a_1 . Es un tipo de celda o celda unitaria que llena todo el espacio mediante la repetición de apropiadas operaciones de traslación del cristal. Es el volumen mínimo de la celda.

Base Primitiva: Es la base asociada con una celda primitiva. Ninguna base contiene menos átomos que los contenidos en una base primitiva.

Vectores primitivos: Los vectores a_i son los vectores primitivos que generan la red.

Celda Wigner-Seitz: Celda unitaria obtenida al tomar un punto en la red y trazar líneas directas a los puntos cercanos en la red, finalmente en el punto medio de cada línea, la unimos mediante otro trazo y el área encerrada por el polígono formado es la celda buscada.

Red grupo puntual: Es la colección de operaciones de simetría las cuales, al aplicarlas a el punto en la lattice, lleva a la red a ella misma.

Redes 2 Dimensiones: Hay un número ilimitado de posibles redes porque no hay restricciones naturales sobre la longitud de traslación de las redes o un ángulo φ entre ellos. Definiendo los vectores primitivos a_1, a_2 , y tomando cuatro tipos diferentes de restricciones nos llevan a cinco redes de Bravais diferentes en 2 dimensiones, la red oblicua, cuadrada, hexagonal, rectangular y red rectangular centrada.

Red de Bravais: concepto fundamental de en la descripción de cualquier sólido cristalino, especificando el arreglo periódico de las unidades del cristal. Esta red resume solamente la geometría de la estructura periódica, además del arreglo la orientación es igualmente de importante, porque debe de verse igual en todo punto de la red de Bravais, sin importar quienes sean sus unidades. Hay dos definiciones,

- Es un arreglo infinito de puntos discretos con una orientación que se observan igual desde cualquier punto del arreglo.
- Consiste de todos los puntos con vectores de posición R de la forma

$$R = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3, \quad (\text{A.3})$$

donde $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ son tres vectores cualesquiera, no todos coplanares y n_i con $i = 1, 2, 3$ enteros. Así el punto $\sum n_i\vec{a}_i$ se alcanza al moverse pasos de longitud \vec{a}_i .

Vectores Recíprocos: Es una base usada en la física de la materia condensada, donde el análisis de Fourier es sencillo de realizar. Construimos los vectores b_1, b_2, b_3 de la siguiente forma,

$$b_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \cdot a_2 \times a_3}, \quad b_2 = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{a_1 \cdot a_2 \times a_3}, \quad b_3 = 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{a_1 \cdot a_2 \times a_3}. \quad (\text{A.4})$$

Cada vector definido por b_i es ortogonal a dos ejes vectores de la lattices del cristal, esto es los vectores b_i con $i = 1, 2, 3$ tienen la propiedad,

$$b_i \cdot a_j = 2\pi\delta_{ij}. \quad (\text{A.5})$$

Vectores en la red directa tienen dimensión [longitud] y vectores en la red recíproca tienen dimensiones de [1/longitud].

Zona de Brillouin: se define como una celda primitiva de Wigner-Seitz en la red recíproca

Red Cúbica: Una de las redes de Bravais más comunes tridimensionales. Los vectores primitivos son perpendiculares entre sí y de igual magnitud.

Red Hexagonal: No es una red de Bravais, debido a que no es invariante ante traslación de vectores.

Redes y Cristales: Las redes de Bravais son infinitas en extensión y los cristales reales son finitos. Sin embargo si son suficientemente grandes, la gran mayoría de sus puntos estarán lejos de la superficie y no se afectarán por su presencia. Es útil usar una forma finita y simple de la red de Bravais, dados vectores primitivos $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ y una red finita de N lugares como el conjunto de puntos tales que si $0 \leq n_1 < N_1, 0 \leq n_2 < N_2$ y $0 \leq n_3 < N_3$, con $N = N_1N_2N_3$, entonces $R = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$. Este truco está conectado con la descripción de sistemas cristalinos con condiciones de frontera periódicas.

Inconvenientes de red de Bravais: El conjunto de vectores primitivos no es único, porque podemos hacer diferentes elecciones de pares de vectores primitivos para una red Bravais bidimensional.

Vecinos Cercanos: Son los puntos más cercanos a un punto dado en la red de Bravais. Por la naturaleza periódica de la red, cada punto tiene el mismo número de vecinos cercanos. A este número se le llama número de coordinación de la red. Para una cúbica simple hay 6, una bcc hay 8 y una fcc hay 12.

Bibliografía

- [1] D. R. Hofstadter, “*Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields*”, Phys. Rev. **B** 14, 2239 (1976).
- [2] M. I. Katsnelson and K. S. Novoselov, *Graphene: new bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics*, Solid State Commun. **I43**, 3 (2007).
- [3] David J. Griffiths, “*Introduction to Quantum Mechanics*”, 2a Ed. Pearson Prentice Hall, (2005), ISBN 0-13-111892-7.
- [4] George Arfken “*Mathematical Methods for Physicists*”, Academic Press Inc., (1985), ISBN: 0-12-059820-5.
- [5] J.C. D’Oliveo, J.F. Nieves and S. Sahu. *Field Theory of the Photon Selfenergy in a medium with a Magnetic Field and Faraday Effect*, Phys. Rev. **D67**, 025018 (2003).
- [6] J. P. Eisenstein, Am. J. Phys., **61** 2, (1993).
- [7] Marvin E. Rensink “*Electron Eigenstates in Uniform Magnetic Field*”, Am. J. Phys., **37**, 900 (1969).
- [8] W. Greiner, “*Quantum Mechanics an Introduction*”, 4th Ed. springer, ISBN 3-540-67458-6.
- [9] Walter Greiner, “*Relativistic Quantum Mechanics*”, Third Edition Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, (2000) , ISBN 3-540-67457-8.
- [10] P. A. M. Dirac, in Paul Adrien Maurice Dirac, ed. by B. N. Kursunoglu and E. P. Wigner, Cambridge, (1987).
- [11] P. A. M. Dirac, Phys. Rev. **139**, B684, (1964).
- [12] Kaushik Bhattacharya, arXiv:0705.4275v1 [hep-th] 2007
- [13] C. Kittel “*Introduction to Solid State Physics*”, 7th ed. (Wiley, New York, 1996).
- [14] Henrik Bruus and Karsten Flensberg, “*Introduction to Many-body quantum theory in condensed matter physics*”, Copenhagen, (2002).
- [15] P. W. Atkins and R. S. Friedman, “*Molecular Quantum Mechanics*”, 3r ed., Oxford University Press, Oxford, (1997), Chap. 8.

- [16] C. A. Coulson, “*The electronic structure of some polyenes and aromatic molecules.IV, The nature of the links of certain free radicals,*”, Proc. R. Soc. London, Ser, **A** 164, 383 (1938).
- [17] A. Matulis and F. M. Peeters, “*Analogy between one-dimensional chain model and graphene*”, Am. J. Phys., **77** 595, (2009).
- [18] James G. Analytis. Stephen J. Blundell and Arzhang Ardavan “*Landau levels, molecular orbitals, and the Hofstadter butterfly in finite systems*”, Am. J. Phys., **72**, 613, (2004).
- [19] Kunold Alejandro, “*Electrones de Bloch y Efecto Hall Cuántico*”, Tesis Doctoral, Instituto de Física UNAM, Mayo del 2003.
- [20] Peierls, R. E. “*Quelques proprietes typiques des corps solides*”, Ann. I. H. Poincare **5**, 177, (1935).
- [21] Landau, L. D. “*Zur Theorie der phasenumwandlungen II*”. Phys. Z. Sowjetunion, **11**, 26, (1937).
- [22] 2012 Macmillan Publishers Limited, “*GRAPHENE OUTLOOK*”, s30, nature, vol **483**, 15 march 2012.
- [23] A. K. Geim and K. S. Novoselov, “*The Rise of Grafene*”, Manchester Center for Mesoscience and Nanotechnology, U. Manchester, Oxford Road M13 9PL, United Kindom.
- [24] Novoselov, K. S. et al. “*Electric field effect in atomically thin carbon films*”. Science **302**, 666, (2004).
- [25] Novoselov, K. S. et al. “*Two-dimensional atomic crystals*”. Proc. Natl Acad. Sci. USA **102** 10451-10453 (2005).
- [26] Novoselov, K. S. et al. “*Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene*”. Nature **438**, 197 (2005).
- [27] R. Rammal “*Landau level of Bloch electrons in a honeycomb lattice*”, J. Physique **46**, 1345, août 1985 .
- [28] F. H. M. Faisal “*Adiabatic solution of Dirac equation graphinos in an intense electromagnetic field and emission of high order harmonics near the Dirac points*”, arXiv:1102.1677v2 [cond-mat.mes-hall] 1 mar 2011
- [29] S. Hernández-Ortiz, G. Murgia and A. Raya “*Hard and soft supersymmetry breaking for graphinos in uniform magnetic fields*”, J. Phys. Condens Matter **24**, 019304, (2012).
- [30] Mahito Kohmoto “*Gauge fields, quantized fluxes and monopoles confinement of the honeycomb lattice*”, Int. J. Mod. Phys. **B** 23, 3113, (2009).
- [31] Alejandro Kunold, “*Electrones de Bloch y Efecto Hall Cuántico*”. Tesis Doctoral, UNAM, (2008).

- [32] Gi-Yeong Oh, “*Comment on Hofstadter butterfly for the hexagonal lattice*”, Phys. Rev. **B**, Vol. 63, 087301, (2001).
- [33] R. Delbourgo, “*On 2D Periodic Hexagonal Cells*”, arXiv:1108.3817v1 [cond-mat.mtrl-sci].