
Propiedades Electrónicas del Grafeno Sometido a Esfuerzos Mecánicos

Tesis de Doctorado
Pedro Eduardo Román Taboada

Comité Tutorial:

Dr. Gerardo García Naumis
Dr. Alejandro Kunold Bello
Dr. Chumin Wang Chen

Instituto de Física UNAM
Departamento de Sistemas Complejos
Ciudad de México, 2018

«La América nuestra –decía Simón Rodríguez, maestro del Libertador Bolívar– no debe imitar. . . ni a Europa, que es ignorante en política; ni a los Estados Unidos, cuyas circunstancias son totalmente distintas. . . Debe ser original”. En lo cultural, como en la filosofía y la ciencia, la imitación debe desaparecer.»

Leopoldo Zea.

Abstract

In the present document, the electronic properties of zigzag and armchair graphene nanoribbons under a time-dependent and time-independent uniaxial deformation field are studied. We have considered two kinds of deformation fields, namely, in-plane and out-of-plane deformation fields. For time-independent deformation fields, the electronic properties were obtained by an exact mapping of the corresponding tight binding Hamiltonian into an effective one-dimensional Hamiltonian. For a spatially-periodic deformation field (in particular, we have chosen a cosine-like deformation field), the system (*i.e.* the strained zigzag or armchair graphene nanoribbon) displays a rich behavior, including quasicrystal and modulated crystal effective behaviors, which leads to a very complex fractal-like energy spectrum. All these features were explained by the incommensurate or commensurate nature of the potential, which leads to a dense filling by diffraction spots of the reciprocal space in the former case. For both kinds of deformation fields, it was found that it is much easier to open a gap in the energy spectrum of an armchair graphene nanoribbon by pulling along the direction perpendicular to the armchair-direction in the armchair graphene nanoribbon than in the case of applying a deformation field perpendicular to the zigzag direction in a zigzag graphene nanoribbon. In fact, in the case of an uniaxial strained armchair nanoribbon, for a special critical value of the amplitude and wavelength of the strain field, a gap is open. Additionally, the size of this gap grows linearly with the strain's amplitude in the critical point's neighborhood. At this critical point, the electrons behave as relativistic Dirac fermions in one direction, while, in the other direction, a non-relativistic Schrödinger behavior is observed.

For the time-dependent deformation field case, we study the emergence of electronic non-trivial topological flat bands in time-periodically driven strained graphene within a tight-binding approach based on the Floquet formalism. In particular, we focus on an uniaxial spatially periodic strain, since, for that case, the Hamiltonian describing the strained nanoribbon can be mapped onto an effective one-dimensional system. We also have studied two kinds of time-periodic driving, namely, an ultra short pulse (delta kicking) and a sinusoidal variation (harmonic driving). We prove that for special strain wavelengths, the system is described by a two-level Dirac Hamiltonian. For a zigzag graphene nanoribbon, even though the study case is gapless, we find that topologically nontrivial flat bands emerge not only at zero-quasienergy but also at $\pm\pi$ quasienergy, the latter being a direct consequence of the periodicity of the Floquet space. Both kind of

flat bands are thus understood as dispersion-less bands joining two inequivalent touching band points with opposite Berry phase. This is confirmed by explicit evaluation of the Berry phase in the touching band points' neighborhood. Using that information, the topological phase diagram of the system is built. Additionally, the experimental feasibility of the model is discussed and two methods for the experimental realization of our model are proposed.

We also report the emergence of electronic edge states in time-periodically driven strained armchair terminated graphene nanoribbons. This is done by considering a short-pulse spatial-periodic strain field. Then, the tight-binding Hamiltonian of the system is mapped into a one-dimensional ladder. The time periodicity is considered within the Floquet formalism. Thus, the quasienergy spectrum is found numerically by diagonalizing the evolution operator. For some particular cases, the quasienergy spectrum was found analytically. We found that the system is able to support gapless and gapped phases. Very different edge states emerge for both the gapless and the gapped phases. In the case of the gapped phase, edge states emerge at the gap centered at zero quasienergy, although the Chern number is zero due to the chiral symmetry of the system. For the gapless phase, besides edge states at zero quasienergy, cosine-like edge states which merge and coexist with the bulk bands were observed. To confirm the topological nature of these edge states, we analytically obtained the effective Hamiltonian and its spectrum for a particular case, finding that the edge states are, at least, topologically weak; no more can be said about the topological properties of this edge states, since, to completely characterize them we need to compute the topological invariant of the full system. Finally, we found analytically the evolution of band edges and their crossings as a function of the driven period for a gapless phase of our system, we found that topological modes arise at such crossings.

Resumen

En este trabajo se estudian las propiedades electrónicas de nanocintas de grafeno con terminación zigzag y armchair sometidas a deformaciones mecánicas uniaxiales dependientes e independientes del tiempo, es importante mencionar que se consideraron dos tipos de deformaciones mecánicas, a saber, deformaciones dentro del plano de la nanocinta y deformaciones fuera de dicho plano (es decir, deformaciones que inducen corrugaciones en la nanocinta). Para el caso de deformaciones mecánicas independientes del tiempo, dichas propiedades electrónicas fueron obtenidas por medio de un mapeo exacto del correspondiente Hamiltoniano de amarre fuerte hacia un Hamiltoniano efectivo unidimensional. Para ambos tipos de nanocintas y deformaciones (en particular estudiamos el caso en el que el campo de deformación es periódico en el espacio y tiene una forma tipo coseno), se encontró un rico comportamiento que incluye la observación de un espectro fractal de energías y la aparición de un comportamiento efectivo tipo cuasi cristal o tipo cristal modulado. Las características anteriores pueden ser explicadas en términos de la conmensurabilidad o inconmensurabilidad del campo de deformación y la nanocinta de grafeno. Para ambos tipos de deformaciones se encontró que es mucho más fácil abrir una brecha energética en la estructura de bandas del grafeno si se aplica el campo de deformación a lo largo de la dirección perpendicular a la dirección armchair en una nanocinta de grafeno con terminación armchair. Para el caso armchair se encontró que es posible abrir una brecha energética en la estructura de bandas de dicha nanocinta si la amplitud de la deformación es mayor que cierto valor crítico. El tamaño de dicha brecha energética crece linealmente con la amplitud del campo de deformación en las cercanías del punto crítico. Cuando uno se encuentra en dicho punto crítico, los electrones exhiben un comportamiento mezclado entre fermiones de Dirac sin masa y fermiones de Schrödinger con masa.

Para el caso en el que la deformación depende del tiempo, se estudió la emergencia de bandas planas que son topológicamente no triviales en nanocintas de grafeno con terminación zigzag sometidas a deformaciones mecánicas moduladas periódicamente en el tiempo, esto se hizo dentro de la aproximación de amarre fuerte y usando el formalismo de Floquet. De igual manera que en el caso estático, nos concentramos en el caso en el que el campo de deformación es uniaxial y periódico en el espacio. En cuanto a la dependencia temporal, se consideraron dos tipos de modulaciones temporales, la primera es un pulso ultra corto (el pulso puede ser aproximado como

una función delta de Dirac) y la segunda es una modulación temporal tipo coseno. Se encontró, para algunos valores de la longitud de onda del campo de deformación, que el sistema puede ser descrito usando un Hamiltoniano de dos niveles. Para una nanocinta de grafeno con terminación zigzag se encontró que, a pesar de que la fase estudiada no tiene brechas energéticas, el sistema es capaz de soportar la existencia de bandas planas que son topológicamente no triviales a cuasi energías cero y $\pm\pi$, en donde las bandas que surgen a cuasi energías $\pm\pi$ son una consecuencia directa de la periodicidad del espacio de Floquet. Los dos tipos de bandas planas pueden entenderse como bandas sin dispersión que unen dos puntos en los cuales los bordes de banda se tocan, cada uno de estos puntos tiene una fase de Berry opuesta a la de su compañero. Esto se confirmó por medio de la evaluación explícita de la fase de Berry en las cercanías de los puntos donde los bordes de banda se tocan. Usando la información anterior se construyó el diagrama de fase del sistema. Adicionalmente, se propusieron dos tipos de experimentos para la posible realización de nuestro modelo.

También se estudió la emergencia de estados de borde en nanocintas de grafeno con terminación armchair sometidas a deformaciones mecánicas periódicamente moduladas en el tiempo. El tipo de modulación considerado fue el de pulsos ultra cortos (es decir, una modulación temporal tipo función delta de Dirac) usando una deformación mecánica uniaxial periódica en el espacio de tipo coseno. Lo anterior se hizo en la aproximación de amarre fuerte y usando la teoría de Floquet. El espectro de cuasi energías fue obtenido por medio de la diagonalización numérica del operador de evolución temporal de un período. Empero, para algunos casos particulares, fuimos capaces de obtener el espectro de cuasi energías de manera analítica. Además, se encontró que el sistema es capaz de dar lugar a fases en las que no hay brechas energéticas en el espectro de cuasi energías y a fases en las que hay brechas energéticas en el espectro de cuasi energías alrededor del cero de la cuasi energía. Para el caso de la fase con brecha energética, la simetría chiral de nuestro sistema impone que dicha brecha energética es topológicamente trivial desde el punto de vista del número de Chern. A pesar de este hecho se observó la emergencia de estados de borde que cierran dicha brecha energética para un sistema de tamaño finito. Por otro lado, para la fase en la que el sistema no tiene brechas energéticas, se encontraron estados de borde alrededor del cero de la cuasi energía y estados de tipo coseno a otras cuasi energías. Los últimos estados se mezclan y coexisten con las bandas del bulto, sin perder su localización del todo. Para confirmar la naturaleza topológica de los estados de borde que se encuentran alrededor del cero de la cuasi energía en la fase en la que el sistema no tiene brechas energéticas se obtuvo de manera analítica el Hamiltoniano efectivo que describe al sistema para una rebanada unidimensional, encontrándose que los estados de borde tienen un carácter topológico débil, no podemos decir más acerca de la naturaleza topológica de dichos estados pues es necesario calcular el invariante topológico del sistema completo para caracterizar completamente dichos estados de borde. Además se obtuvo analíticamente la evolución de los bordes de banda del espectro de cuasi energías y los puntos en los cuales las bandas se invierten, observándose que estados de borde emergen en esos puntos.

Índice general

| | |
|--|-----------|
| Abstract | v |
| Resumen | vii |
| Detalles de la Tesis | xiii |
| Prefacio | xv |
| I Grafeno puro | 1 |
| Propiedades electrónicas del grafeno | 3 |
| 1. Hoja Infinita de Grafeno | 4 |
| 2. Nanocintas de Grafeno | 8 |
| 2.1. Nanocintas de grafeno con terminación zigzag | 8 |
| 2.2. Nanocintas de grafeno con terminación armchair | 10 |
| II Grafeno deformado: Caso independiente del tiempo | 13 |
| Nanocintas de grafeno deformadas en el plano | 15 |
| 3. Nanocintas de grafeno con terminación zigzag | 20 |
| 3.1. Espectro de energía como función de σ | 21 |
| 3.2. Espectro de energía como función de λ | 25 |
| 3.3. Conclusiones | 28 |
| 4. Nanocintas de grafeno con terminación armchair | 28 |
| 4.1. Espectro de energía como función de σ y λ | 30 |
| 4.2. Caso $\sigma = 1/2$: Fermiones de Schrödinger y de Dirac | 34 |
| 4.3. Conclusiones | 40 |

| | |
|---|-----------|
| Nanocintas de grafeno deformadas fuera del plano | 41 |
| 5. Nanocintas de grafeno con terminación armchair | 43 |
| 5.1. Caso conmensurable: $\sigma = 1/\sqrt{3}$ | 46 |
| 5.2. Caso incommensurable | 46 |
| 5.3. Conclusiones | 47 |
| 6. Nanocintas de grafeno con terminación zigzag | 47 |
| 6.1. Caso $\sigma = 1/2$ | 50 |
| 6.2. Caso $\sigma = 1$ | 50 |
| 6.3. Conclusiones | 51 |
| | |
| III Grafeno deformado: Caso dependiente del tiempo | 53 |
| | |
| Nanocintas de grafeno con terminación zigzag | 55 |
| 7. Deformación dentro del plano de la nanocinta | 57 |
| 7.1. Espectro de cuasi energías: Resultados numéricos | 61 |
| 7.2. Estudio analítico del espectro de cuasi energías | 63 |
| 7.3. Soluciones tipo I | 67 |
| 7.4. Soluciones tipo II | 72 |
| 7.5. Diagrama de fase topológico | 73 |
| 7.6. Caracterización topológica de los estados de borde | 73 |
| 7.7. Posible realización experimental | 76 |
| 8. Deformación dentro del plano de la nanocinta | 80 |
| 8.1. Estados de borde | 84 |
| 9. Conclusiones | 88 |
| | |
| Nanocintas de grafeno con terminación armchair | 89 |
| 10. Deformaciones dentro del plano | 91 |
| 10.1. Espectro de cuasi energías | 93 |
| 10.2. Propiedades topológicas de los estados de borde | 96 |
| 10.3. Estudio analítico de la topología para $\sigma = 1/\sqrt{3}$ en $k_x = 0$ | 99 |
| 10.4. Conclusiones | 106 |

| | |
|---|------------|
| Índice general | XI |
| IV Bibliografía | 109 |
| V Artículos Publicados | 125 |
| A. Mapping of strained graphene into one-dimensional Hamiltonians: Quasicrystals and modulated crystals | 127 |
| B. Spectral butterfly, mixed Dirac-Schrödinger fermion behavior, and topological states in armchair uniaxial strained graphene | 135 |
| C. Spectral butterfly and electronic localization in rippled-graphene nanoribbons: Mapping onto effective one-dimensional chains | 145 |
| D. Topological flat bands in time-periodically driven uniaxial strained graphene nanoribbons | 155 |
| E. Topological edge states on time-periodically strained armchair graphene nanoribbons | 169 |

Detalles de la Tesis

| | |
|---------------------------------|---|
| Titulo de la Tesis: | Propiedades electrónicas del grafeno sometido a esfuerzos mecánicos |
| Estudiante de Doctorado: | Pedro Eduardo Roman Taboada |
| Supervisores: | Dr. Gerardo García Naumis, IF UNAM Dr. Alejandro Kunold Bello, UAM AZC Dr. Chumin Wang Chen, IIM UNAM |

El contenido principal de esta tesis consiste de los siguientes artículos.

- [A] Gerardo G. Naumis, Pedro Roman-Taboada, “Mapping of strained graphene into one-dimensional Hamiltonians: Quasicrystals and modulated crystals,” *Physical Review B*, 89 (24), 241404 (2014).
- [B] Pedro Roman-Taboada, Gerardo G. Naumis, “Spectral butterfly, mixed Dirac-Schrödinger fermion behavior, and topological states in armchair uniaxial strained graphene,” *Physical Review B*, Physical Review B 90 (19), 195435 (2014).
- [C] Pedro Roman-Taboada, Gerardo G. Naumis, “Spectral butterfly and electronic localization in rippled-graphene nanoribbons: Mapping onto effective one-dimensional chains,” *Physical Review B*, Physical Review B 92 (3), 035406 (2015).
- [D] Pedro Roman-Taboada, Gerardo G. Naumis, “Topological flat bands in time-periodically driven uniaxial strained graphene nanoribbons,” *Physical Review B*, Physical Review B 95 (11), 115440 (2017).
- [E] Pedro Roman-Taboada, Gerardo G. Naumis, “Topological edge states on time-periodically strained armchair graphene nanoribbons,” *Physical Review B*, accepted (2017).
- [??] Pedro Roman-Taboada, Gerardo G. Naumis, “Topological edge states on time-periodically rippled zigzag graphene nanoribbons,” *Journal of Physics Communications*, submitted (2017).

Los autores de los artículos agradecen las discusiones e ideas aportadas por Maurice Oliva Leyva, las cuales han sido fundamentales para el desarrollo de este proyecto de investigación.

Prefacio

Begin at the beginning, the King said gravely, “and go on till you come to the end: then stop.”

—Lewis Carroll, *Alice in Wonderland*

El grafeno fue el primer material verdaderamente bidimensional (2D) sintetizado por el hombre en el año 2004, este hecho fue tan importante que originó una abrumadora e intensa investigación alrededor del grafeno, por ejemplo, el artículo en el que se anuncia el descubrimiento del grafeno cuenta a la fecha con más de 38,000 citas, ver [1]. Pocos años después del descubrimiento experimental del grafeno sus descubridores (Novoselov y Geim) fueron galardonados con el premio nobel de física en el año 2010. Aunque el descubrimiento del grafeno se realizó hace apenas 14 años, sus propiedades físicas ya habían sido estudiadas hace más de 70 años, esto se debe, principalmente, al apogeo de la energía nuclear en ese entonces. De hecho el bien conocido artículo del Dr. P. D. Wallace titulado *the band structure of graphite* [2], el cual fue quizás el primer artículo en describir las propiedades electrónicas del grafeno (se escribió en el año 1947), surgió como un intento de entender el efecto de bombardear intensamente, con iones y neutrones, al grafito y a otros materiales. Años más tarde, en 1962 para ser exactos, el grupo de investigación dirigido por el Dr. Boehm acuñó el término grafeno al estudiar absorción en películas muy delgadas de carbono [3]. Entonces, si el grafeno se conoce, al menos teóricamente, desde hace tanto tiempo, ¿por qué fue que se descubrió tan recientemente? Desde mi punto de vista hay varios factores que pudieron haber retrasado la observación experimental del grafeno, entre ellos, quizás el más importante haya sido la ausencia de aparatos experimentales lo suficientemente sensibles como para detectar una capa de grosor atómico, agréguese además que el grafeno es prácticamente

transparente (de hecho el grafeno sólo absorbe el 2% de la radiación electromagnética [4, 5]). Por otro lado, se consideraba, al menos teóricamente, que era prácticamente imposible sintetizar un material puramente bidimensional, pues Peierls y Landau habían predicho que las estructuras bidimensionales eran inestables debido a fluctuaciones térmicas divergentes que surgen a temperaturas diferentes del cero absoluto. Sin embargo, dicho teorema debido a Peierls y Landau únicamente es válido para el caso de estructuras bidimensionales planas. El grafeno, en cambio, no es plano. De hecho cuenta con pequeñas corrugaciones¹ que ayudan a estabilizar su estructura cancelando las divergencias en las fluctuaciones térmicas.

Dejando de lado la parte histórica, el descubrimiento del grafeno fue un parteaguas en la física del estado sólido. Esto se debe, por un lado, a la bidimensionalidad del grafeno y, por el otro, a las excelentes propiedades mecánicas y electrónicas que posee. Es importante mencionar que desde que el grafeno fue sintetizado por primera vez, toda una gama de nuevos materiales bidimensionales ha sido obtenida de manera experimental [7], dichos materiales han sido sintetizados usando técnicas similares a las usadas para la obtención del grafeno. Un hecho interesante es que muchos de los nuevos materiales bidimensionales descubiertos poseen características similares a las del grafeno, en particular, muchos de ellos presentan una dispersión lineal en sus estructuras de bandas a bajas energías (esto es, la mayoría de estos nuevos materiales tienen conos de Dirac, ver la parte I para una descripción detallada acerca de lo que es un cono de Dirac), aunque también cuentan con nuevas e interesantes propiedades no vistas en el grafeno[7].

Entre las propiedades que vuelven al grafeno un material tan atractivo, único y exótico, uno puede mencionar las siguientes: i) en lo que respecta a sus propiedades térmicas, el grafeno posee una conductividad térmica extremadamente alta comparada con la conductividad térmica de otros materiales tridimensionales. De hecho la conductividad térmica del grafeno oscila alrededor de 5×10^2 W/mK [8]. ii) En lo que respecta a sus propiedades ópticas, el grafeno es prácticamente transparente pues únicamente absorbe el 2.3% de la radiación electromagnética que sobre él incide [4, 5]. iii) En cuanto a sus propiedades mecánicas, las propiedades del grafeno son extraordinarias. Por ejemplo, el módulo de elasticidad de una hoja suspendida de grafeno es de alrededor de 0.25 TPa [9]. Además, una membrana macroscópica de grafeno tiene una rigidez extraordinaria, sin embargo, a pesar de eso, es extremadamente flexible [10]. De hecho, el grafeno puede ser deformado elásticamente hasta en un 23% de su parámetro de red [11], siendo capaz de regresar a su posición inicial después de que la deformación deja de ser aplicada. Todas las propiedades anteriores hacían pensar que el grafeno sería el sustituto ideal del silicio en la microelectrónica actual, sin embargo, esto no es posible, no al menos de una manera directa. La razón de esto es que el grafeno cuenta con una brecha energética de tamaño cero, en otras palabras, el grafeno es

¹Experimentalmente se ha observado que las corrugaciones en grafeno alcanzan alturas de unos pocos angstroms y que dichas corrugaciones se extienden a lo largo de varios nanómetros a temperatura ambiente [6]. Las tales corrugaciones también son las responsables de la alta conductividad térmica del grafeno.

un semimetal². Adicionalmente, la relación de dispersión del grafeno es lineal a bajas energías, o, lo que es lo mismo, la banda de valencia y la banda de conducción se tocan en un punto siguiendo una relación de dispersión cónica alrededor de ese punto, más aún, el punto en el que las bandas de valencia y de conducción se tocan, coincide con el nivel de Fermi del grafeno. Esto implica que los electrones en grafeno se comportan como electrones de Dirac sin masa, que en lugar de moverse a la velocidad de la luz se mueven a la velocidad de Fermi. De tal suerte, no es posible generar en grafeno estados de ‘encendido’ y ‘apagado’ como se hace en los transistores actuales, los cuales están hechos en su mayoría de materiales semiconductores³. Por esta razón es que gran parte de la investigación relacionada al grafeno se haya concentrado en encontrar una manera de inducir una brecha energética distinta de cero en su estructura de bandas, para de esta manera aprovechar todas sus extraordinarias propiedades en el campo de la microelectrónica. Existe una vasta cantidad de maneras para inducir una brecha energética en la estructura de bandas del grafeno, entre ellas tenemos la aplicación de deformaciones mecánicas, la aplicación de radiación electromagnética, la modificación de las fronteras de las nanocintas de grafeno, entre muchas otras. En particular, la aplicación de deformación mecánica al grafeno ha llamado mucho la atención debido a las excelentes propiedades mecánicas del grafeno y ha conducido a la creación de un nuevo campo conocido como *straintronics* (tensiotrónica en español) [12]. Esto no es otra cosa que la manipulación controlada de las propiedades electrónicas del grafeno por medio de deformaciones mecánicas.

De la discusión anterior, surge de manera natural la siguiente pregunta, *¿Cómo se modifican las propiedades electrónicas del grafeno cuando es sometido a deformaciones mecánicas?* El enfoque usual seguido en la literatura para responder a esta pregunta consiste en escribir un conjunto efectivo de ecuaciones que únicamente son válidas en las cercanías de los conos de Dirac⁴ (es decir, únicamente son válidas en la aproximación de bajas energías) dentro de la aproximación de amarre fuerte⁵ [13, 14, 15, 16, 17, 18, 19]. Bajo tales aproximaciones el campo de deformación puede ser visto como un pseudo campo magnético efectivo. Sin embargo, no siempre es posible escribir

²Un semimetal es un material en el cual las bandas de valencia (de hecho la parte más alta de esta banda) y las bandas de conducción (para ser exactos, la parte más baja de la banda de conducción) se superponen en una región muy pequeña, de tal suerte que el nivel de Fermi cae en el punto medio de dicho traslape. El grafeno, por otro lado, es un semimetal perfecto pues la banda de valencia y conducción se tocan en un punto con el nivel de Fermi ubicado ahí.

³En los semiconductores sí hay una brecha energética que permite, por medio de la aplicación de voltaje, controlar el flujo de corriente a través del material, lo que genera los estados de ‘encendido’ y ‘apagado’.

⁴El cono de Dirac es la relación de dispersión del grafeno a bajas energías, se le llama cono pues en las cercanías del nivel de Fermi la relación de dispersión es lineal en el cuasi momento del cristal. Mientras que el punto de Dirac es el punto en donde las bandas de valencia y conducción se tocan, en el grafeno este punto coincide con el nivel de Fermi.

⁵En la aproximación de amarre fuerte se considera que las propiedades electrónicas de un material están adecuadamente descritas al considerar que los electrones de los átomos del material únicamente pueden ‘saltar’ a los vecinos más cercanos del átomo al que pertenecen.

dicho conjunto de ecuaciones efectivas. Por ejemplo, como se verá más adelante, si el campo de deformación no es conmensurable con la hoja o nanocinta de grafeno, el enfoque perturbativo usado para resolver el conjunto de ecuaciones efectivas deja de ser válido debido al problema de divisores pequeños. Otro factor que debe ser considerado es el hecho de que el grafeno no es completamente plano sino que presenta pequeñas corrugaciones que lo ayudan a estabilizarse [6], tales corrugaciones afectan las propiedades electrónicas del grafeno de alguna u otra manera, que generalmente empeoran las propiedades electrónicas del grafeno plano. De ahí que sea crucial tener un mejor entendimiento sobre la forma en la que las deformaciones mecánicas modifican las propiedades electrónicas del grafeno, sobre todo si se busca la futura implementación tecnológica del grafeno. Por todos los motivos anteriores, el objetivo principal de esta tesis es *analizar cómo se modifican las propiedades electrónicas de nanocintas de grafeno con terminación zigzag o armchair cuando éstas son sometidas a deformaciones mecánicas no uniformes (las cuales pueden o no depender del tiempo) aplicadas a lo largo de direcciones bien definidas, en este trabajo nos restringiremos a deformaciones aplicadas a lo largo de las direcciones zigzag y armchair.*

En lo que resta de este documento, después de una breve introducción sobre las propiedades electrónicas de hojas y nanocintas de grafeno en estado puro, nos concentramos en estudiar las propiedades electrónicas de nanocintas de grafeno con terminaciones ya sea zigzag o armchair sometidas a deformaciones uniaxiales periódicas en el espacio, en particular, estudiamos el caso en el que la deformación tiene una forma de tipo cosenoidal. Cabe mencionarse que hemos considerado deformaciones dentro y fuera del plano de la nanocinta (de hecho, el último tipo de deformación es capaz de inducir corrugaciones en la nanocinta, este tipo de deformación es tratado en los capítulos 5 y 6). Adicionalmente, el campo de deformación considerado puede ser independiente o dependiente del tiempo. Para el caso estático se encontraron varias características interesantes, entre ellas tenemos un complejo espectro de energías con características fractales cuando se considera la dependencia de dicho espectro con la frecuencia del campo de deformación aplicado. También se observó que dependiendo de las características del campo de deformación aplicado el sistema se puede comportar ya sea como un cuasi cristal, ya sea como un cristal modulado. Esto puede entenderse en términos de la conmensurabilidad o inconmensurabilidad del campo de deformación y la nanocinta de grafeno en consideración. El resultado más importante quizás sea el hecho de que es posible abrir una brecha energética en la estructura de bandas de una nanocinta de grafeno con terminación zigzag o armchair⁶. Además se encontró que abrir una brecha energética es más fácil en el caso de una nanocinta de grafeno con terminación armchair por medio de la aplicación de un campo de deformación a lo largo de la dirección perpendicular a la dirección armchair de dicha nanocinta que haciendo lo mismo pero usando una nanocinta con terminación zigzag. Por otro lado, en el caso en el que la deformación mecánica depende del

⁶Este resultado es importante pues se sabía que para deformaciones uniformes aplicadas en nanocintas de grafeno con terminación zigzag no es posible abrir una brecha energética si la deformación se aplica en la dirección armchair, ver [20].

tiempo, para el caso de nanocintas de grafeno con terminación zigzag (este sistema únicamente es capaz de soportar fases en las que no hay brechas energéticas distintas de cero) se encontraron bandas planas en el espectro de cuasi energías del sistema. Dichas bandas planas se originan debido a la dependencia temporal del campo de deformación y pueden ser entendidas de manera similar a como son entendidas las bandas planas que aparecen en nanocintas finitas de grafeno con terminación zigzag [21]. En el caso de nanocintas de grafeno con terminación armchair sometidas de deformaciones uniaxiales dependientes del tiempo, se encontraron estados de borde que tienen características topológicas no triviales en una fase en la que el sistema tiene una brecha energética. En la fase en la que el sistema no tiene brecha energética también se encontraron estados de borde con dispersión tipo coseno que se mezclan y coexisten con las bandas del bulto.

La tesis se organiza como sigue, en la Parte I, se hace una breve introducción a las propiedades electrónicas de hojas infinitas de grafeno y de nanocintas de grafeno con terminación zigzag y armchair. En la Parte II se discute como se modifican las propiedades electrónicas de nanocintas de grafeno con terminaciones zigzag o armchair sometidas a deformaciones mecánicas estáticas uniaxiales periódicas en el espacio. En esta parte se discuten tanto el caso de deformaciones dentro del plano de la nanocinta como deformaciones fuera del plano de la nanocinta. En la Parte III, se discute la emergencia de estados de borde topológicamente no triviales en el caso de nanocintas de grafeno con terminaciones zigzag y armchair sometidas a deformaciones mecánicas uniaxiales periódicas en el espacio moduladas periódicamente en el tiempo. En la Parte IV se presenta la bibliografía consultada. Finalmente en la Parte V hemos adjuntado los artículos que fueron publicados a lo largo del proyecto de doctorado.

Pedro Eduardo Roman Taboada
Instituto de Física, UNAM
22 de noviembre de 2017

Parte I
Grafeno puro

Propiedades electrónicas del grafeno

Para comenzar es conveniente listar las aproximaciones, que usaremos a lo largo del presente capítulo, para describir las propiedades electrónicas de grafeno puro. Se usarán tres aproximaciones, a saber,

1. La aproximación de un electrón. Es decir, despreciaremos las interacciones tipo Coulomb entre electrones.
2. La aproximación de amarre fuerte. Es decir, se considerará que los electrones en grafeno están fuertemente ligados a sus átomos, de tal suerte que los electrones interactúan débilmente con sus vecinos lejanos. En particular, únicamente consideraremos que un electrón es capaz de saltar a los átomos vecinos más cercano al átomo al que pertenece. Es decir, nos restringiremos a estudiar la aproximación de amarre fuerte a primeros vecinos.
3. Asumiremos que el grafeno está formado por átomos que se encuentran fijos en una estructura hexagonal que es plana.

Antes de continuar, es necesario dar una justificación del por qué es válido usar las aproximaciones antes mencionadas. Para las aproximaciones 1 y 2 podemos decir que el grafeno tiene un comportamiento predominantemente de amarre fuerte. Esto se debe a que en el grafeno la hibridación sp^2 conduce a la formación de una estructura trigonal plana (es decir, una estructura hexagonal, ver Fig. 1), en la cual los tres orbitales híbridos sp^2 forman enlaces fuertemente covalentes con sus vecinos más cercanos formando ángulos de 120° entre ellos. Así, dos átomos que forman uno de estos enlaces se encuentran separados por una distancia de $a_c = 1,42 \text{ \AA}$. Dichos enlaces forman orbitales σ y son los responsables de las excelentes propiedades mecánicas del grafeno y de su estabilidad. Por otro lado, el orbital restante p_z no se mezcla con los demás y permanece perpendicular al plano del grafeno. La interacción entre orbitales p_z vecinos producirá orbitales π que describen las excitaciones de baja energía del grafeno. Dado que cada uno de los orbitales p_z contribuye con un único electrón, es razonable usar la aproximación 1. Por otro lado, la aproximación 2, es válida siempre que las interacciones con átomos lejanos sean pequeñas. Dado que estamos restringidos al regimen de bajas energías, las interacciones dominantes son aquellas entre

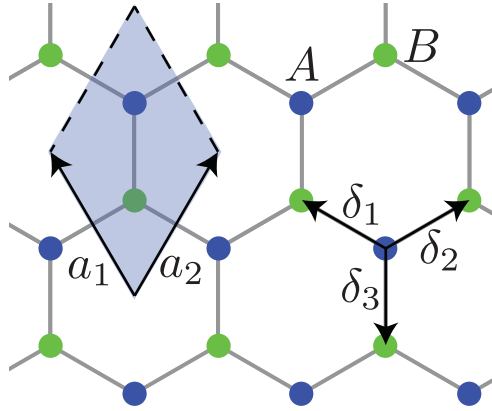


Figura 1: Estructura cristalina del grafeno. Como puede verse, esta red está formada por dos subredes triangulares, A y B , interpenetradas, por lo que no es una red de Bravais. Los vectores a primeros vecinos (de átomos tipo A a átomos tipo B y viceversa) están representados por $\vec{\delta}_1$, $\vec{\delta}_2$ y $\vec{\delta}_3$. La celda unitaria contiene dos átomos (polígono sombreado), con vectores base, \vec{a}_1 y \vec{a}_2 .

átomos vecinos más cercanos, por lo tanto, usar la aproximación 2 queda justificada en el régimen de bajas energías. Finalmente, la aproximación 3 será válida siempre que la muestra de grafeno considerada sea grande en comparación con la altura máxima de las corrugaciones presentes en grafeno suspendido. Debido a que la altura máxima de dichas corrugaciones está alrededor de los 0,5 nm [6], los efectos de dichas corrugaciones en las propiedades electrónicas del grafeno son despreciables para muestras de varias decenas de nanómetros.

Después de haber enunciado las aproximaciones a ser usadas, el siguiente paso es describir brevemente las propiedades electrónicas del grafeno. Este será el objetivo de lo que resta del capítulo. Primero se revisarán las propiedades electrónicas de una hoja infinita de grafeno. Posteriormente se estudiará el caso de nanocintas de grafeno con terminaciones zigzag y armchair.

1. Hoja Infinita de Grafeno

Comenzaremos por describir la estructura cristalina del grafeno. Como fue mencionado arriba, los átomos en grafeno se organizan en una estructura cristalina hexagonal, debido a la hibridación orbital sp^2 , ver Fig. 1. Es un hecho bien conocido que una red hexagonal no es una red de Bravais, pues está formada por dos redes triangulares interpenetradas. Sin embargo, la red hexagonal puede ser vista como una red triangular con dos átomos (es decir, la celda unitaria del grafeno contiene dos tipos diferentes de átomos denotados por A y B en la Fig. 1) por celda unitaria. Si se considera la celda unitaria mostrada en la Fig. 1, los vectores base son los siguientes,

$$\vec{a}_1 = \frac{a_c}{2}(-\sqrt{3}, 3), \quad \vec{a}_2 = \frac{a_c}{2}(\sqrt{3}, 3). \quad (1)$$

Es importante observar que cada uno de los átomos tipo A en grafeno está rodeado por átomos tipo B y viceversa. Resulta útil definir los tres vectores que conectan átomos tipo A con sus tres

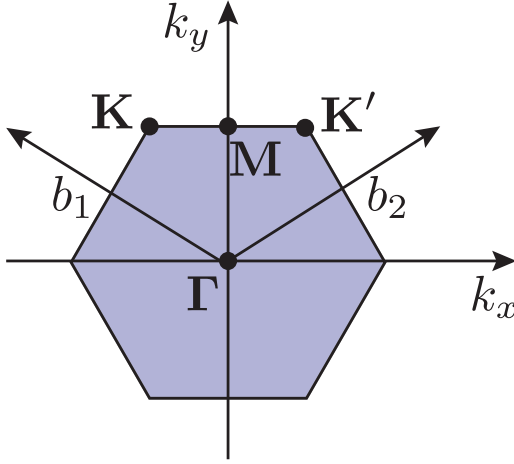


Figura 2: Primera zona de Brillouin del grafeno, además se muestran los puntos de alta simetría de la red recíproca (Γ , \vec{M} y \vec{K}) y los vectores recíprocos (\vec{b}_1 y \vec{b}_2).

primeros vecinos (ver Fig. 1), dichos vectores están dados por,

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a_c}{2} (\sqrt{3}, 1), \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a_c}{2} (-\sqrt{3}, 1), \quad \vec{\delta}_3 = a_c (0, -1). \quad (2)$$

La red recíproca de una red hexagonal es también hexagonal. Esto es fácil de comprobar al trazar la celda de Wigner-Seitz en el espacio recíproco. En la Fig. 2 se presenta la primera zona de Brillouin del grafeno. Además se muestran los vectores recíprocos de dicha celda, los cuales están dados por,

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a_c} \left(-1, \frac{\sqrt{3}}{3}\right), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a_c} \left(1, \frac{\sqrt{3}}{3}\right). \quad (3)$$

Para concluir con la revisión de la estructura cristalina del grafeno, definiremos los puntos de alta simetría de la red recíproca, los cuales están dados por,

$$\Gamma = (0, 0), \quad \vec{M} = \frac{2\pi}{3a_c} (0, 1), \quad \vec{K} = \frac{2\pi}{3a_c} \left(-\frac{1}{\sqrt{3}}, 1\right), \quad \vec{K}' = \frac{2\pi}{3a_c} \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, 1\right). \quad (4)$$

Por razones que se aclararán más adelante, a los puntos \vec{K} y \vec{K}' se les conoce como puntos de Dirac y juegan un papel fundamental en la descripción de las propiedades del grafeno puro y deformado en la aproximación de bajas energías.

Ya que se ha establecido la estructura cristalina del grafeno, procedemos a calcular su estructura de bandas. Para esto utilizaremos un Hamiltoniano de amarre fuerte que describe el salto de un electrón de un átomo tipo A a un átomo de tipo B. Tal Hamiltoniano, en el formalismo de segunda cuantización, puede ser escrito como sigue,

$$H = - \sum_{\vec{r}, n} \gamma_0 c_{\vec{r}}^\dagger c_{\vec{r} + \vec{\delta}_n} + \text{h.c.}, \quad (5)$$

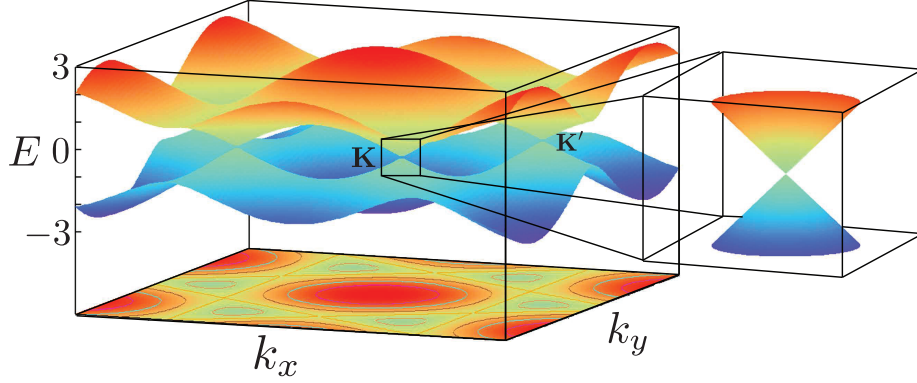


Figura 3: Relación de dispersión para grafeno sin deformar en la aproximación de amarre fuerte. Como puede verse, cerca de los puntos de Dirac (\vec{K} y \vec{K}'), es decir, para bajas energías, los electrones siguen una relación de dispersión lineal, por lo tanto, pueden ser vistos como fermiones de Dirac sin masa (ver texto).

donde \vec{r} representa las coordenadas de los átomos de carbono en la hoja de grafeno, el operador $c_{\vec{r}}$ ($c_{\vec{r}}^\dagger$) aniquila (crea) un electrón en el sitio de la red con posición \vec{r} , γ_0 es la integral de salto, cuyo valor ha sido medido experimentalmente siendo $\gamma_0 \approx 2,7 \text{ eV}$ [22], $\vec{\delta}_n$ son los vectores que conectan al átomo en la posición \vec{r} con sus tres primeros vecinos, aquí $n = 1, 2, 3$, definidos en la Ec. (2).

Para diagonalizar el Hamiltoniano (5) basta con notar que la hoja infinita de grafeno es periódica en las direcciones x y y , esto nos permite definir al cuasi momento en la dirección x y y , denotaremos dichos cuasi momentos como k_x y k_y , respectivamente. Como el sistema es periódico k_x y k_y son buenos números cuánticos. Se sigue que uno puede reemplazar los operadores de creación y aniquilación en la Ec. (5) por sus desarrollos en series de Taylor en el espacio recíproco. Dichos desarrollos están dados por,

$$c_{\vec{r}}^\dagger = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{r}\cdot\vec{k}} c_{\vec{k}}^\dagger, \quad (6)$$

donde $\vec{k} = (k_x, k_y)$ es el vector pseudo momento. Al sustituir la ecuación (6) en el Hamiltoniano (5) obtenemos,

$$H = \sum_{\vec{k}, n} \gamma_0 e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_n} c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}} + \text{h.c.}, \quad (7)$$

de la ecuación anterior se sigue que la relación de dispersión para grafeno sin deformar está dada por,

$$E(\vec{k}) = \pm \gamma_0 \left| \sum_n e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_n} \right| = \pm \gamma_0 \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}k_x a_c) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a_c\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_y a_c\right)}. \quad (8)$$

Para la banda ‘enlace’ π (antienlace π^*) se debe considerar el signo ‘-’ (‘+’) en la ecuación (8). La relación de dispersión obtenida por medio de la Ec. (8) se muestra en la Fig. 3, como puede verse, en la aproximación de amarre fuerte y a primeros vecinos es simétrica con respecto al nivel de Fermi ($E = 0$), esto no sucede cuando se consideran interacciones a segundos vecinos[2]. También en la Fig. 3 se pueden observar los puntos \vec{K} y \vec{K}' y un acercamiento alrededor de ellos. Es interesante notar que alrededor de los puntos de Dirac y a bajas energías, la relación de dispersión es proporcional a $|\vec{k}|$, lo que sugiere un comportamiento similar al de fermiones de Dirac sin masa, donde, la constante de proporcionalidad sería el equivalente a la velocidad de la luz. Para obtener esta constante se debe hacer un desarrollo en serie de Taylor de la ecuación (8) alrededor del punto \vec{K} sustituyendo $\vec{k} = \vec{q} + \vec{K}$ con $\vec{q} \ll \vec{K}$. Haciendo lo anterior y después de algunas manipulaciones algebraicas se obtiene,

$$E_{\pm} = \pm v_F |\vec{q}| + O(q^2/K^2), \quad (9)$$

donde v_F es la velocidad de Fermi dada por

$$v_F = \frac{3}{2\hbar} \gamma_0 a_c \quad (10)$$

y tiene un valor de numérico de $v_F \approx 1 \times 10^6$ m/s [22], es decir, alrededor de 1/300 de la velocidad de la luz. Note que en la definición de v_F aparece el parámetro de salto, esto se debe a que estamos en la aproximación de amarre fuerte. Dada la relación de dispersión lineal, para bajas energías o escalas de longitud grandes, esto es, en la vecindad de los puntos de Dirac, el Hamiltoniano para grafeno puro pueda escribirse como,

$$H = v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{q}, \quad (11)$$

donde, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ son dos matrices de Pauli. Cabe mencionar que a este Hamiltoniano se le conoce como Hamiltoniano de Dirac, sin embargo, no es propiamente una ecuación de Dirac. En el contexto de materia condensada cualquier Hamiltoniano que sea lineal en el momento y tenga la siguiente forma

$$H = \sum_i \alpha_i p_i v_i + \sum_j \beta_j m_j, \quad (12)$$

es conocido como un Hamiltoniano de Dirac. En el Hamiltoniano (11) los términos v_i son llamados términos de velocidad y los términos m_j son conocidos como términos de masa. Las propiedades de simetría de tal Hamiltoniano están totalmente determinadas por las matrices α y β , que son matrices de tamaño 2×2 . Por otro lado, debido a que el espectro del Hamiltoniano de Dirac no está limitado ni para energías positivas grandes ni para energías negativas grandes, *este Hamiltoniano representa un modelo efectivo de baja energía.*

Es importante decir que al suponer que la hoja de grafeno es infinita, básicamente hemos despreciado los efectos de borde. Sin embargo, si el sistema es considerado finito, como es el

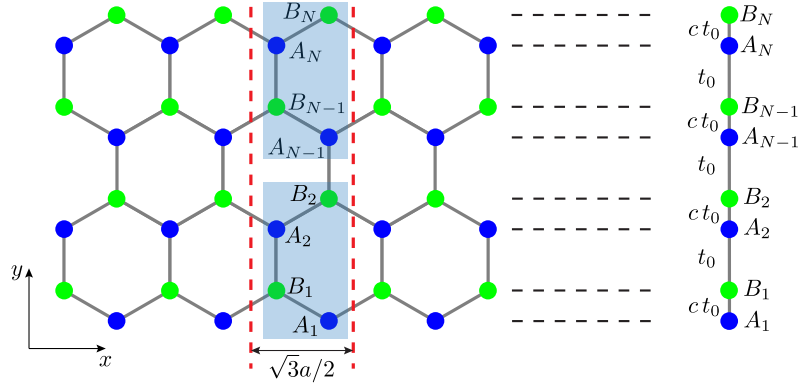


Figura 4: Nanocinta de grafeno con terminación *zigzag*. Panel derecho. Dentro de las líneas punteadas rojas se muestra la celda unitaria del sistema, la cual, a su vez, está formada por celdas más pequeñas formadas por cuatro átomos diferentes, estas celdas están indicadas con un recuadro sombreado. Panel izquierdo. Dada la celda unitaria del sistema, este puede ser visto como un cadena lineal efectiva con dos parámetros de salto diferentes, a saber, t_0 y $t_0 c(k_x)$

caso de las nanocintas de grafeno, los bordes pueden modificar la estructura de bandas mostrada en la Fig. 3. Dado que en los capítulos siguientes trabajaremos con nanocintas de grafeno, es conveniente describir, aunque sea de manera breve, las estructuras de bandas de nanocintas de grafeno con terminaciones en zigzag y armchair. Esto será hecho en el próximo capítulo.

2. Nanocintas de Grafeno

Las nanocintas de grafeno pueden ser obtenidas al cortar grafeno a lo largo de alguna dirección dada. Dependiendo del tipo de borde de la nanocinta esta recibe diferentes nombres. Las terminaciones más comunes y las únicas tratadas aquí son las llamadas zigzag y armchair. Cada una de las terminaciones anteriores tiene propiedades distintas, por lo tanto, se estudiarán por separado. Este estudio será hecho usando las mismas aproximaciones usadas en el caso de una hoja infinita de grafeno. Por simplicidad, de ahora en adelante, nos referiremos a las nanocintas de grafeno con terminación zigzag como NGZ. Del mismo modo, llamaremos a las nanocintas de grafeno con terminación armchair como NGA.

2.1. Nanocintas de grafeno con terminación zigzag

Uno puede obtener mucha información sobre las propiedades electrónicas de NGZ al escribir el Hamiltoniano de amarre fuerte en términos de sumas de Bloch, en otras palabras, al aprovechar la periodicidad del sistema a lo largo del eje x si uno elige los ejes como en la Fig. 4, nótese que

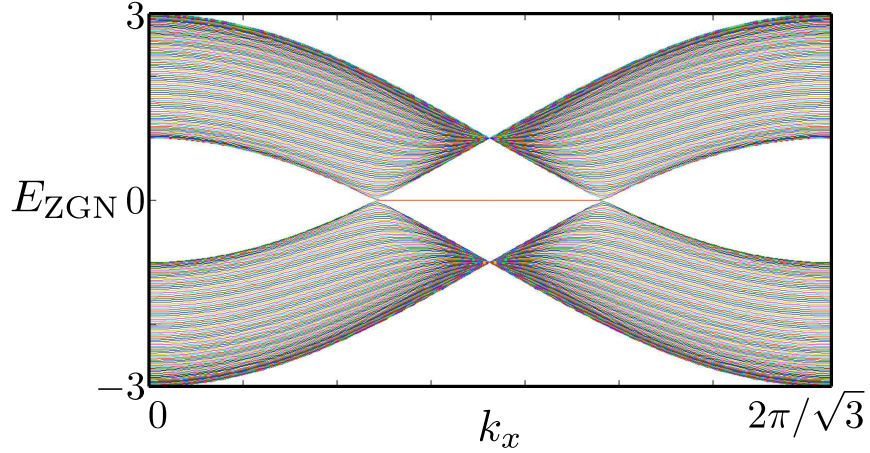


Figura 5: Relación de dispersión para una ZGN obtenida por medio de la diagonalización numérica del Hamiltoniano (13) para condiciones de frontera fijas. Nótese el estado de borde de energía cero que comienza y termina en los conos de Dirac, es decir, en $k_x = \pm 2\pi/(3\sqrt{3}a)$. Este estado no aparece cuando se consideran condiciones de frontera cíclicas.

la nanocinta está compuesta de super celdas hechas de cadenas lineales de átomos de carbono, ver Fig. 4 en donde la celda unitaria se encuentra dentro de líneas rojas punteadas. Como dicha super celda se repite a lo largo de la dirección x de manera periódica, uno puede trabajar en el espacio recíproco de la nanocinta pues el cuasi momento a lo largo de la dirección x , k_x , es un buen número cuántico. Tomando ventaja de la periodicidad a lo largo del eje x es fácil demostrar que el Hamiltoniano de amarre fuerte en el formalismo de segunda cuantización que describe a la NGZ puede ser escrito como [23],

$$H(k_x) = \gamma_0 \sum_{j=1}^{N-1} \left[a_{2j+1}^\dagger b_{2j} + c(k_x) a_{2j-1}^\dagger b_{2j} \right], \quad (13)$$

donde N es el número de átomos por celda unitaria, a_j^\dagger (b_j^\dagger) crea un electrón en el j -ésimo sitio de un átomo tipo A (B), ver Fig. 4. Finalmente, tenemos que $c(k_x) = 2 \cos(\sqrt{3}k_x a_c/2)$. Es importante mencionar que para obtener el Hamiltoniano anterior hemos ordenado la base de eigenfunciones de la siguiente manera: $A_1, B_1, A_2, B_2, \dots, A_N, B_N$. Observe que el Hamiltoniano (13) es equivalente al Hamiltoniano de una cadena unidimensional, como la mostrada en la parte derecha de la Fig. 4, para una k_x fija.

Uno puede obtener la estructura de bandas por medio de la diagonalización numérica de la representación matricial del Hamiltoniano (13). Dicha estructura de bandas es mostrada en la Fig. 5 para un sistema con $N = 160$. En dicha figura podemos observar varias características importantes, a saber, *i*) los puntos de Dirac observados en una hoja infinita de grafeno son

mapeados a los puntos $k_x = 4\pi/(3\sqrt{3}a_c)$. *ii*) Hay dos bandas planas parcialmente degeneradas a energía cero entre los puntos de Dirac y la frontera de la primera zona de Brillouin, dichas bandas planas están formadas de funciones de onda que están localizadas principalmente en los bordes de la nanocinta. *iii*) Las bandas están altamente degeneradas en $k_x = \pi/\sqrt{3}$, es decir, en los bordes de la primera zona de Brillouin. *iv*) Alrededor de los conos de Dirac y cerca del punto de neutralidad de carga⁷ los niveles de energía son equidistantes. Todas las características antes mencionadas pueden ser entendidas en términos del sistema efectivo unidimensional. Sin embargo, debido a cuestiones de espacio su descripción no se realiza en esta sección sino en el Apéndice A, también puede consultarse la referencia [23] para una descripción más detallada.

Por otro lado, cabe mencionarse que es posible obtener de manera analítica la estructura de bandas para una NGZ. La forma de obtener dicho resultado consiste en escribir la ecuación de Schrödinger para la NGZ y después imponer que la función de onda sea cero en las fronteras. Debido a que aquí sólo se está dando un breve repaso de las propiedades electrónicas de NGZs, únicamente se presentarán los resultados, para más detalles sobre el cálculo, ver, por ejemplo, la referencia [24]. Básicamente, uno obtiene que la energía de una nanocinta infinita de grafeno con terminación zigzag o armchair está dada por,

$$E_{\pm} = \pm \sqrt{1 \pm 4 |\cos(\xi_j/2) \cos(\kappa/2)| + 4 \cos^2(\xi_j/2)} \quad (14)$$

con

$$\frac{\sin(\kappa_{\pm} N)}{\sin[\kappa_{\pm}(N + 1/2)]} = \mp 2 \cos(\xi_j/2). \quad (15)$$

Para el caso de una nanocinta infinita de grafeno con terminación zigzag tenemos que hacer la siguiente sustitución en las ecuaciones (14) y (15), $\xi = \sqrt{3}a_c k_y$, es decir, la variable ξ_j debe ser tratada como continua. Además es necesario realizar la siguiente sustitución para tomar en cuenta el hecho de que la nanocinta es finita a lo largo de la dirección x , $\kappa = \kappa_j = 2\pi j/N$, con $j = 1, 2, \dots, N - 1$.

2.2. Nanocintas de grafeno con terminación armchair

Al igual que en el caso de nanocintas de grafeno con terminación zigzag, uno puede obtener mucha intuición sobre las propiedades electrónicas de nanocintas de grafeno con terminación armchair (NGAs) al escribir el Hamiltoniano de la nanocinta en términos de las sumas de Bloch, aprovechando la periodicidad a lo largo del eje x , esto si los ejes están colocados como en la Fig. 6.

⁷El punto de neutralidad de carga es la posición del nivel de Fermi de tal manera que la superficie del material en consideración (en nuestro caso la superficie equivaldría a los bordes de la nanocinta de grafeno) es eléctricamente neutra. De tal suerte, cuando el nivel de Fermi está por encima del punto de neutralidad de carga la superficie está cargada positivamente y si el nivel de Fermi se encuentra debajo del punto de neutralidad de carga, la superficie se carga positivamente.

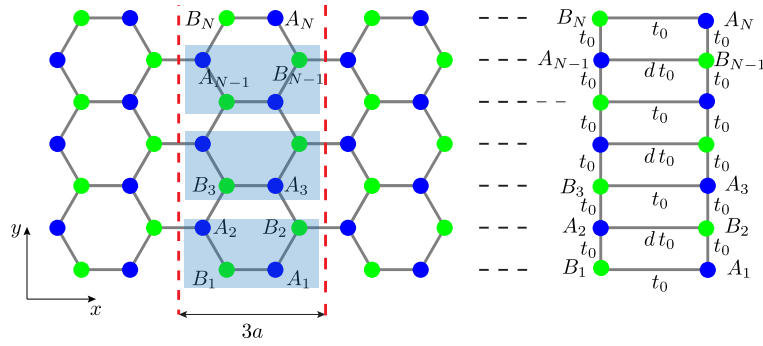


Figura 6: Nanocinta de grafeno con terminación *armchair*. Panel derecho. La celda unitaria está indicada dentro de las líneas rojas punteadas. Debido a la simetría del problema, la celda unitaria puede ser vista como formada por celdas más pequeñas (recuadros sombreados), cada de las cuales cuenta con cuatro átomos diferentes. Panel izquierdo. Por otro lado, es posible mapear el sistema a dos cadenas acopladas con parámetros de salto entre cadenas dados por γ_0 y $\gamma_0 d(k_x)$.

Si ordenamos la base de eigenfunciones como se hizo en el caso de NGZ, esto es, $A_1, B_2, \dots, A_N, B_N$ y tomamos la celda unitaria del sistema como la celda mostrada entre líneas rojas punteadas en la Fig. 6, el Hamiltoniano de amarre fuerte en el formalismo de segunda cuantización para una NGA sin deformar se puede escribir como[23],

$$H(k_x) = \sum_{j=1}^{N/2} \gamma_0 \left[d(k_x) a_{2j}^\dagger b_{2j} + a_{2j+1}^\dagger b_{2j+1} + a_j^\dagger b_{j+1} \right] + \text{h.c.}, \quad (16)$$

donde $d(k_x) = \exp(3a_c k_x)$, los operadores a_j^\dagger y b_j^\dagger , crean un electron en el j -ésimo átomo tipo A y tipo B, respectivamente. N es el número de átomos dentro de la celda unitaria de la NGA. Este Hamiltoniano es equivalente a una dos cadenas unidimensionales acopladas como las mostradas en la parte derecha de la Fig. 6.

Al igual que en la sección anterior, uno puede obtener la estructura de bandas para este tipo de nanocinta al diagonalizar numéricamente la representación matricial del Hamiltoniano (16), ver la referencia [23]. En la Fig. 7 mostramos la estructura de bandas obtenida por el método antes descrito para un sistema con $N = 160$. Hay varios comentarios por hacer. Primero nótese que la dispersión es lineal alrededor de $k_x = 0$, en otras palabras los conos de Dirac observados en la estructura de bandas de la hoja infinita de grafeno (ver Fig. 3) han sido mapeados a un único punto de Dirac en $k_x = 0$. Esto puede ser entendido al proyectar la estructura bidimensional de la hoja infinita de grafeno, Fig. 3, a lo largo de la dirección *armchair*. En el punto $k_x = 0$ el sistema efectivo (esto es, la escalera unidimensional mostrada a la derecha en la Fig. 6) se vuelve una escalera con dos piernas y N escalones cada uno de los cuales tiene un parámetro de salto dado por γ_0 , ver la referencia [23] para más detalles acerca de esta estructura de bandas. Es importante mencionar que para todos los cálculos realizados para NGA hemos usado que el

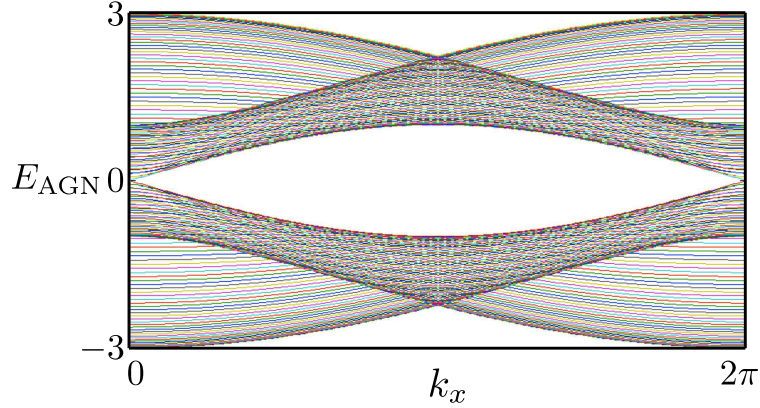


Figura 7: Estructura de bandas para una AGN sin deformar. Nótese la relación lineal de la energía con el momento cerca de los puntos $k_x a_c = 0$ y $k_x = 2\pi$. Estos puntos son los conocidos conos de Dirac. La gráfica fue obtenida por medio de la diagonalización numérica de la representación matricial del Hamiltoniano (16) usando $N = 3m + 2$ sitios, con $m = 15$.

número de átomos de la celda unitaria está dado por $N = 3m + 2$, donde m es un entero positivo o cero. La importancia de esta aclaración radica en el hecho de que las propiedades electrónicas de una NGA cambian en función del número de átomos por celda unitaria. Por ejemplo, para $N = 3m + 2$ la NGA es metálica mientras que es semiconductor en otros casos [23].

Finalmente, del mismo modo que en el caso de nanocintas infinitas de grafeno con terminación zigzag, es posible encontrar las eigenenergías de una nanocinta de grafeno infinita con terminación armchair analíticamente. El procedimiento es el mismo que el que fue usado en el caso NGZ. De hecho, las energías están dadas únicamente por la ecuación (14) con $\pi \leq \kappa = 3a_c k_x \leq \pi$ y $\xi_j = 2\pi j/N$, con $j = 0, 1, \dots, N - 1$.

Parte II

Grafeno deformado: Caso independiente del tiempo

Nanocintas de grafeno deformadas en el plano

En esta segunda parte de la tesis comienza la presentación de los resultados obtenidos a lo largo de la investigación realizada durante el proyecto de doctorado. Iniciaremos por estudiar los efectos de deformaciones mecánicas (a lo largo de lo que resta de este documento únicamente analizaremos el caso de deformación uniaxial) en las propiedades electrónicas de nanocintas de grafeno con terminaciones zigzag o armchair. La importancia de este tipo de estudios viene del hecho de que el grafeno es un semimetal, lo que dificulta su uso como reemplazo del silicio en la electrónica actual, pues en un semimetal no es posible la generación de estados de ‘encendido’ y ‘apagado’ que se requiere en cualquier transistor. De ahí la importancia de encontrar una forma de generar una brecha energética en la estructura de bandas del grafeno. El hecho de que el grafeno tenga una propiedades mecánicas fuera de lo común y de que sus propiedades electrónicas dependen fuertemente de los campos de deformación aplicados a él abre la posibilidad de crear una brecha energética en su estructura de bandas de manera controlada por medio de su deformación mecánica, incluso esto ha dado lugar a la creación de un nuevo campo conocido como *straintronics*, que es la manipulación controlada de las propiedades electrónicas de un material por medio de deformaciones mecánicas [20, 22, 25, 26, 27]. En realidad, este método ha resultado ser útil para lograr abrir una brecha energética en el grafeno. De hecho se ha demostrado que al aplicar deformaciones uniformes uniaxiales a lo largo de la dirección zigzag de grafeno es posible generar una brecha energética en la estructura de bandas del grafeno [20]. Sin embargo, la fase semi metálica del grafeno es muy robusta y, por lo tanto, muy difícil de superar, si es que es posible hacerlo dentro del régimen lineal de su respuesta elástica. En verdad, para alcanzar la fase aislante del grafeno se requieren deformaciones con amplitudes del orden del 20 % del parámetro de red (a_c) del grafeno⁸. Desafortunadamente, para esas amplitudes de la deformación, el grafeno se encuentra en el régimen de respuesta elástica no lineal, por lo tanto, los efectos no lineales

⁸Esto se debe básicamente a que para abrir una brecha energética en grafeno es necesario aniquilar los conos de Dirac por medio de su fusión [20]. Dado que los conos de Dirac están protegidos topológicamente uno requiere aplicar tensiones muy grandes (alrededor del 20 % del parámetro de red del grafeno, esto es, casi la máxima deformación que el grafeno puede soportar elásticamente, ver la referencia [11]).

jugarían un papel importante en las propiedades electrónicas del grafeno y deberían ser tomados en cuenta. Otro factor a ser tomado en cuenta es el hecho de que cuando el grafeno suspendido es sometido a tensiones de amplitudes que van de moderadas a altas (comparadas con el parámetro de red del grafeno, de hecho la respuesta elástica del grafeno es de alrededor del 25 % de su parámetro de red [11]), el arreglo plano de átomos de carbono se vuelve inestable comparado con un arreglo de átomos corrugados o torcidos (buckled, en inglés) [20]. Incluso el grafeno puede tener una falla mecánica, este problema puede ser resuelto al colocar al grafeno sobre un sustrato, lo que le concedería mayor estabilidad y una respuesta elástica lineal, al menos para deformaciones menores al 18 % de su parámetro de red, a_c [28]. Un punto importante a ser notado es que los resultados anteriores son válidos únicamente para el caso de deformaciones *uniformes* en el plano, dichas deformaciones pueden aplicarse ya sea a lo largo de la dirección zigzag o lo largo de la dirección armchair⁹.

Por otro lado, *¿qué pasa si en lugar de aplicar una deformación uniaxial uniforme se aplica una deformación uniaxial no uniforme?* El objetivo de esta segunda parte de la tesis es responder a la pregunta anterior. Para responder a la pregunta antes planteada, realizamos un mapeo del Hamiltoniano bidimensional de amarre fuerte que describe las propiedades electrónicas de la nanocinta deformada hacia un Hamiltoniano efectivo unidimensional. Como se verá más adelante, la respuesta a la pregunta es muy interesante. De hecho, bajo ciertas circunstancias el campo de deformación favorece la observación de un comportamiento cuasi cristalino de los electrones en la nanocinta de grafeno (este resultado es válido para nanocintas con terminación zigzag o armchair). Este tipo de comportamiento cuasi cristalino ya ha sido observado en bicapas de grafeno (en las que cada monocapa está rotada con respecto a la otra) sometidas a campos magnéticos [29, 30, 31, 32]. Como se verá más adelante, un efecto similar puede ser producido en monocapas de grafeno bajo deformaciones mecánicas uniaxiales. Adicionalmente, encontraremos que el cambio de las propiedades electrónicas del grafeno sometido a deformaciones depende fuertemente del tipo de terminación de la nanocinta de grafeno, resultado que es de esperarse dado los resultados observados en nanocintas deformadas uniformemente ver, por ejemplo, la referencia [20]. En lo que sigue nos centraremos en el caso de deformaciones dentro del plano de la nanocinta (es decir, deformaciones que no doblan o corrugan a la nanocinta de grafeno) y que, además, son uniaxiales. En particular, consideraremos el caso de deformación uniaxial periódica en el espacio aplicada a nanocintas con terminación zigzag y armchair. Es importante decir que primero consideraremos el caso de deformaciones uniaxiales dentro del plano de la nanocinta, en otras palabras, en lo que sigue y en los capítulos 3 y 4, sólo consideraremos deformaciones que no inducen corrugaciones en la hoja del grafeno. El caso de corrugaciones será estudiado en la otra mitad de esta parte de la tesis, es decir, en los capítulos 5 y 6.

⁹A decir verdad es bien sabido que aplicar deformación a lo largo de la dirección armchair ha demostrado ser mucho más efectivo para abrir una brecha energética que aplicar deformación a lo largo de la dirección zigzag, caso para el cual es prácticamente imposible abrir una brecha energética [20].

Todos los cálculos aquí expuestos se han llevado a cabo dentro de las aproximaciones definidas en la parte I del presente documento. Sin embargo, es necesario incluir una aproximación más. Debido a que el grafeno exhibe propiedades elásticas no lineales para tensiones grandes, a partir de ahora trabajaremos dentro del límite de amplitudes de deformación pequeñas comparadas con el parámetro de red.

Antes de entrar de lleno a analizar las propiedades electrónicas de nanocintas de grafeno deformadas uniaxialmente, daremos algunos resultados que son válidos para cualquier tipo de terminación de la nanocinta, estos resultados tienen que ver con cómo incluir los efectos de deformación en el Hamiltoniano de amarre fuerte. Si se aplica un campo de fuerzas sobre el grafeno, un patrón de deformación aparece en la hoja o nanocinta de grafeno en consideración. Esto induce que los átomos cambien su posición con respecto a su posición original en la que no se ejerce ninguna fuerza, de hecho las nuevas posiciones de los átomos en el grafeno deformado están dadas por,

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{u}(\vec{r}), \quad (17)$$

donde $\vec{r} = (x, y)$ son las posiciones de los átomos de carbono en grafeno sin deformar. Un punto crucial a ser notado es que uno debe encontrar la forma precisa del campo de fuerzas necesario para producir el patrón de deformación deseado, en este caso denotado por $\vec{u}(\vec{r})$. De forma usual, el campo de fuerzas necesario es encontrado invirtiendo las ecuaciones de elasticidad de Lamé [33]. Estas ecuaciones han sido resueltas para algunos casos en grafeno. Por ejemplo, para producir campos pseudo magnéticos uniformes [34, 35]. En general invertir las ecuaciones de la elasticidad de Lamé es un problema muy complicado y no siempre es posible. Una alternativa para resolver dicho conjunto de ecuaciones es utilizar métodos de tamaño finito. Por el momento supongamos que aplicamos el siguiente campo de deformación a una nanocinta de grafeno,

$$\vec{u}(\vec{r}) = (u_x(y), u_y(y)), \quad (18)$$

el cual únicamente depende de la componente y de las posiciones de los átomos en grafeno sin deformar. Por simplicidad, en lo que sigue consideraremos el caso en el que $u_x(y) = 0$. Antes de continuar, haremos una breve discusión acerca de la posible realización experimental del campo de deformación Ec. (18). Dicha realización experimental es complicada debido a que en el grafeno existe una gran asimetría en los esfuerzos mecánicos que se le pueden aplicar [36], pues aunque los enlaces C–C pueden ser estirados hasta en un 20 % del parámetro de red, es casi imposible comprimirlos porque el grafeno se corrugaría antes o tendría una falla mecánica. Afortunadamente, hay algunas formas de obtener un campo de deformación uniaxial como el mostrado en la Ec. (18). Primero, el campo de deformación que proponemos, puede ser realizado sin necesidad de comprimir los enlaces C–C si la red de grafeno se encuentra en un estado de expansión uniforme, pues entonces algunos enlaces se comprimen más que otros. Si ese es el caso, lo único que cambiaría es la distancia interatómica en la red de grafeno y los resultados que obtendremos

más adelante siguen siendo válidos pero es necesario renormalizarlos. Incluso si el grafeno presenta corrugaciones éstas pueden ser consideradas, a primera aproximación, como un campo de deformación [37]. También, se ha probado que el grafeno cuando crece sobre algún sustrato es sometido a un patrón de deformación uniaxial [38].

Para obtener las propiedades electrónicas de la nanocinta deformada, tenemos que notar que la deformación induce cambios en las posiciones de los átomos de carbono en el grafeno, lo que a su vez provoca que el traslape entre orbitales atómicos sea distinto al observado en el grafeno sin deformar. Por lo tanto uno espera que la integral de salto¹⁰ dependa de las nuevas posiciones de los átomos originadas por el campo de deformación. Entonces, el Hamiltoniano de amarre fuerte para grafeno bajo un campo de deformación dado por $\vec{u}(\vec{r})$ toma la siguiente forma [39],

$$H = - \sum_{\vec{r}', n} \gamma_{\vec{r}', \vec{r}' + \vec{\delta}'_n} c_{\vec{r}'}^\dagger c_{\vec{r}' + \vec{\delta}'_n} + \text{h.c.}, \quad (19)$$

donde $\vec{r}' = \vec{r} + \vec{u}(\vec{r})$ corre sobre los sitios de la red deformada, \vec{r} son las posiciones de los átomos en la red de grafeno sin deformar y $\vec{\delta}'_n$ son los vectores que van desde el átomo en la posición \vec{r}' a sus tres primeros vecinos en la red deformada. El operador $c_{\vec{r}'}$ ($c_{\vec{r}'}^\dagger$) aniquila (crea) un electrón en el sitio de la red deformada con posición \vec{r}' . Finalmente, la integral de salto $\gamma_{\vec{r}', \vec{r}' + \vec{\delta}'_n}$ ya no es constante, sino que depende de la posición, pues la deformación induce cambios en la longitud de enlace entre los átomos de carbono, lo cual aumenta o disminuye el traslape entre las funciones de onda de los átomos. La forma en que el parámetro de salto depende de la distancia, cuando un campo de deformación es aplicado, ya ha sido obtenida previamente [38, 34] y está dada por la siguiente expresión,

$$\gamma_{\vec{r}', \vec{r}' + \vec{\delta}'_n} = \gamma_0 \exp \left[-\beta \left(\delta l_{\vec{r}', \vec{r}' + \vec{\delta}'_n} / a_c \right) \right], \quad (20)$$

donde $\beta \approx 3,37$ es una constante, llamada parámetro de Grüneisen, que modula la integral de salto con la variación de la distancia interatómica [38, 40], $a_c = 1,47\text{\AA}$ es el parámetro de red y $\gamma_0 = 2,7$ eV es la integral de salto para grafeno sin deformar. Es importante mencionar que los parámetros de salto mostrados en la Ec. (20) son válidos siempre y cuando las amplitudes de las deformaciones consideradas sean menores al 20 % del parámetro de red del grafeno [20]. Para simplificar las fórmulas y los cálculos, desde aquí, se considerará que $\gamma_0 = a_c = 1$, a menos que, por claridad, sea necesario escribirlas explícitamente. Finalmente, $\delta l_{\vec{r}', \vec{r}' + \vec{\delta}'_n}$ es la variación de la distancia generada por la deformación en comparación con la distancia entre átomos de carbono, a_c , en la red sin deformar. La dependencia de $\delta l_{\vec{r}', \vec{r}' + \vec{\delta}'_n}$ sobre el campo de deformación \vec{u} y sobre

¹⁰El parámetro de salto (o integral de salto) es la energía necesaria para que un electrón pueda ‘saltar’ del átomo al que pertenece a alguno de los átomos más cercanos. Para clarificar consideremos los siguientes casos límite, $\gamma \rightarrow 0$, indica que el electrón no tiene forma de ‘saltar’ a sitios vecinos. Este límite equivale al caso de átomos totalmente aislados. Por otro lado, si el parámetro de salto se enciende ($\gamma > 0$) el electrón puede saltar del átomo al que pertenece a sitios vecinos, es decir, puede estar en ambos lugares minimizando su energía.

las posiciones de la red sin deformar (\vec{r}), es la siguiente,

$$\delta l_{\vec{r}', \vec{r}' + \vec{\delta}'_n} = \left| \vec{\delta}_n + \vec{u}(\vec{r} + \vec{\delta}_n) - \vec{u}(\vec{r}) \right| - a_c. \quad (21)$$

donde \vec{r} son las posiciones de los átomos de carbono en la nanocinta sin deformar y $\vec{\delta}_n$ son los vectores definidos en la Ec. (2) para grafeno sin deformar. Para entender la cantidad $\delta l_{\vec{r}', \vec{r}' + \vec{\delta}'_n}$, considere el siguiente caso límite, $\vec{u}(\vec{r}) = 0$, en este caso, debido a que no se ha modificado la red, tenemos $\delta l_{\vec{r}', \vec{r}' + \vec{\delta}'_n} = 0$ y, sustituyendo en la ecuación (20), obtenemos $\gamma_{\vec{r}', n} = \gamma_0$, como se esperaba. Para $\delta l_{\vec{r}', \vec{r}' + \vec{\delta}'_n} \neq 0$ y positiva, la integral de salto disminuye exponencialmente a medida que $\delta l_{\vec{r}', \vec{r}' + \vec{\delta}'_n}$ aumenta, como es de esperarse, pues el traslape entre las funciones de onda disminuye a medida que los átomos se encuentran más alejados unos de otros.

Dado que necesitamos el límite de amplitudes de deformación pequeñas, uno puede aproximar la cantidad $\delta l_{\vec{r}', \vec{r}' + \vec{\delta}'_n}$ para el caso en el que $|u(\vec{r})| \ll a_c$. Si hacemos el desarrollo en series de Taylor uno encuentra que, para ese límite, la ecuación (21) está dada por,

$$\delta l_{\vec{r}', \vec{r}' + \vec{\delta}'_n} \approx \left| \vec{\delta}_n \right| \cdot \left[\vec{u}(\vec{r} + \vec{\delta}_n) - \vec{u}(\vec{r}) \right]. \quad (22)$$

Finalmente, debido a que sólo nos interesa el caso de deformación uniaxial, la ecuación (22) puede ser simplificada aún más. De ahora en adelante consideraremos un campo de deformación uniaxial que será aplicado únicamente a lo largo de la dirección y , es decir, el campo de deformación sólo dependerá de la componente y de las posiciones de grafeno sin deformar y no modificará la componente x de tales posiciones. Para este caso, $\vec{u}(\vec{r}) = (0, u(y))$, la ecuación (22) toma la siguiente forma,

$$\delta l_{\vec{r}', \vec{r}' + \vec{\delta}'_n} \approx |\delta_n^y| [u(y + \delta_n^y) - u(y)], \quad (23)$$

donde δ_n^y representa la componente y del vector que une al átomo en la posición \vec{r} con su primer vecino dentro de la celda unitaria de la nanocinta de grafeno sin deformar (ver Fig. 4 para una nanocinta con terminación zigzag y Fig. 6 para una nanocinta con terminación armchair). Para el caso de una nanocinta de grafeno (ya sea con terminación zigzag o armchair) sometida a una deformación que no rompe la simetría del sistema a lo largo de la dirección x como $\vec{u}(\vec{r}) = (0, u(y))$, la ecuación (23) puede ser escrita, en el límite de amplitudes de deformación pequeñas, como,

$$\delta l_{j, j+1} \approx \delta_{j, j+1}^y [u(y_{j+1}) - u(y_j)], \quad (24)$$

donde $\delta_{j, j+1}^y = y_{j+1} - y_j$ representa la distancia en y entre el j -ésimo átomo y el $(j+1)$ -ésimo átomo en grafeno sin deformar y y_j representa la componente y de la posición del j -ésimo átomo dentro de la celda unitaria de la nanocinta en consideración (ver Fig. 4 para ver la celda unitaria de una NGZ y ver la Fig. 6 para ver la celda unitaria de una NGA). Por lo tanto, los parámetros de salto, en esta aproximación (la aproximación de amplitudes de deformación pequeñas comparadas con el parámetro de red del grafeno), están dados por,

$$\gamma_j = \gamma_0 [1 - \beta (\delta l_{j, j+1}) / a_c]. \quad (25)$$

La expresión Ec. (25) será válida únicamente para amplitudes de deformación menores que aproximadamente el 10 % hasta el 15 % del parámetro de red del grafeno [41].

Para terminar, se introducirá el logaritmo de la razón de participación normalizada, que representaremos por NPR (por sus siglas en inglés *normalized participation ratio*) y que está definido como [12, 42],

$$NPR(E) = \frac{\ln \left[\sum_{j=1}^N |\psi_j|^4 \right]}{\ln N}, \quad (26)$$

donde la suma se realiza sobre los sitios de la celda unitaria, $\psi(j)$ es la función de onda de un electrón en el sitio j a una energía E y N es el número de átomos por celda unitaria. El NPR es una medida de la localización de la función de onda, pues, básicamente, mide el volumen ocupado por dicha función de onda (para el caso en el que el sistema estudiado sea bidimensional el NPR es una medida del *área* de la función de onda). Para una función de onda totalmente extendida tenemos que $NPR(E) \rightarrow -1$, mientras que para un estado totalmente localizado tiende a valores cercanos a cero.

3. Nanocintas de grafeno con terminación zigzag

En la parte I discutimos como tratar las propiedades electrónicas de una nanocinta de grafeno con terminación zigzag sin deformar via un Hamiltoniano de amarre fuerte. Dicho Hamiltoniano resultó ser equivalente al Hamiltoniano de una cadena unidimensional para una k_x fija. Uno de los resultados más importantes del presente trabajo es que las propiedades electrónicas de una NGZ deformada de manera uniaxial [deformación aplicada a lo largo de la dirección y y que no rompe la simetría traslacional a lo largo de la dirección x , digamos, una deformación $\vec{u}(\vec{r}) = (0, u(y))$] también pueden ser descritas por un Hamiltoniano efectivo unidimensional. Tal Hamiltoniano está dado por,

$$H(k_x) = \sum_{j=1}^{N-1} \left[\gamma_{2j} a_{2j+1}^\dagger b_{2j} + c(k_x) \gamma_{2j-1} a_{2j-1}^\dagger b_{2j} \right]. \quad (27)$$

donde los parámetros de salto están dados por la ecuaciones (24) y (25). La componente y_j de la posición del j -ésimo átomo de carbono dentro de la celda unitaria de la NGZ está dada por,

$$y_j = \frac{1}{4} \left\{ 3(j-1) + \frac{1}{2} [1 + (-1)^j] \right\}. \quad (28)$$

El Hamiltoniano (27) describe las propiedades electrónicas de una nanocinta de grafeno con terminación zigzag sometida a cualquier campo de deformación uniaxial dado por $\vec{u}(y_j) = u(y_j) = (0, u(y_j))$. A pesar de que via las ecuaciones (24), (25), (27) y (28) es posible estudiar las propiedades electrónicas de una NGZ sometida a cualquier campo de deformación uniaxial, nos

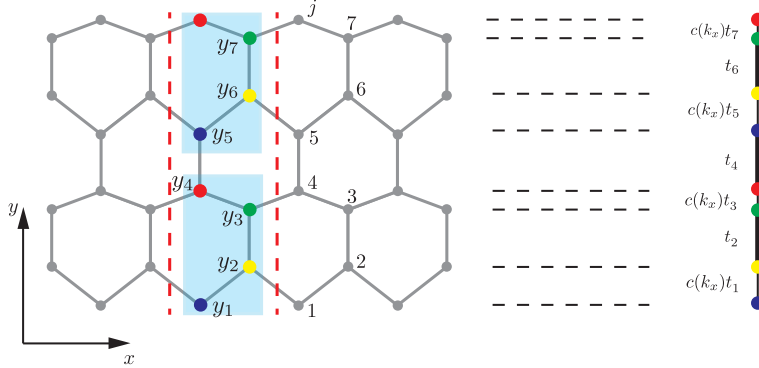


Figura 8: Mapeo de ZGN hacia una cadena 1D. La nanocinta es infinita y periódica en la dirección x . La deformación se aplica en la dirección y y únicamente modifica la posición de los sitios en esa coordenada. La celda unitaria se muestra limitada por líneas punteadas rojas, dentro en recuadros sombreados se pueden ver las celdas más pequeñas que forman la celda unitaria.

enfocaremos únicamente en el caso de deformación uniaxiales y periódicas en el espacio. Esto con fines de comparación con trabajos similares y con visos hacia la posible realización experimental de nuestro modelo. En particular, consideraremos un campo de deformación uniaxial definido como,

$$u(y_j) = \frac{2\lambda}{3\beta} \cos \left[\frac{8\pi}{3} \sigma (y_j - 1/2) + \phi \right]. \quad (29)$$

El campo anterior se ha elegido en dicha forma para simplificar los cálculos, sin embargo la forma cosenoidal es el tipo de deformación que se espera ver cuando se crece grafeno sobre un sustrato con parámetro diferente al del grafeno [43]. Los parámetros propios del campo de deformación son la amplitud (λ), la frecuencia (σ) y la fase (ϕ). y_j es la componente y de la posición del j -ésimo átomo en la celda unitaria de una nanocinta de grafeno con terminación zigzag, definidas en la Ec. (28). En la Fig. 8 mostramos un ejemplo típico de como se deformaría una nanocinta con terminación zigzag sometida a un campo de deformación $u(y_j)$ arbitrario. Ahí mismo mostramos la celda unitaria del sistema, en la figura se encuentra limitada por líneas rojas punteadas, como puede verse, la celda unitaria es una cadena de átomos unidimensional lo que implica que la nanocinta puede ser estudiada como una cadena unidimensional efectiva, ver la parte derecha de la Fig. 8. El Hamiltoniano (27) describe dicha cadena unidimensional efectiva.

3.1. Espectro de energía como función de σ

Para el campo de deformación dado por la Ec. (29), los parámetros de salto (en el límite de amplitudes pequeñas de deformación) toman la siguiente forma,

$$t_j = 1 + \lambda \xi_{j+1} \sin(\pi \sigma \xi_j) \sin(2\pi \sigma j + \phi). \quad (30)$$

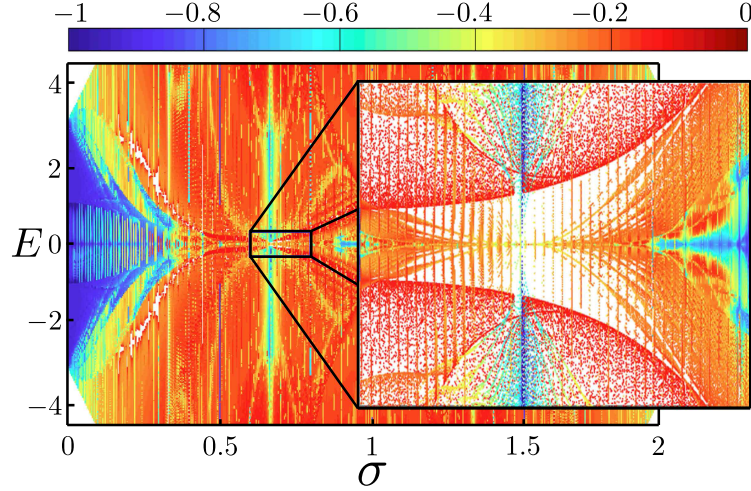


Figura 9: Espectro de energía como función de σ para $\lambda = 2$, $\phi = 4\pi\sigma/3$ y usando condiciones de frontera periódicas, obtenido por medio de la diagonalización numérica de la ecuación (27), para un sistema de 200 átomos. También se muestra un acercamiento al nivel de Fermi ($E = 0$). Los colores representan el logaritmo de la razón de participación normalizada $\ln[NPr(E)]$ (ver texto).

donde

$$\xi_j = 1 - [(-1)^j/3]. \quad (31)$$

Al igual que en el caso sin deformar, el Hamiltoniano (27) y las ecuaciones (24), (25) y (28) describen una cadena unidimensional para cada valor fijo de k_x . Nótese la similitud de nuestro modelo con la ecuación de Harper [44], de hecho la única diferencia con dicho modelo es que nuestros parámetros de salto Ec. (30) cuentan con una modulación que no aparece en el modelo de Harper, a saber, $\xi_{j+1} \sin(\pi\sigma\xi_j)$. Debido a esta similitud se espera que el espectro del Hamiltoniano (27), como función de la frecuencia de deformación (que en nuestro modelo juega el mismo papel que el flujo magnético en el modelo de Harper), sea muy complejo y exhiba algún atisbo de fractalidad, como en el caso de la mariposa de Hofstadter [45]. Uno puede comprobar o rechazar la conjetura previa de manera muy sencilla, basta con obtener la representación matricial del Hamiltoniano (27) para cada valor de k_x (dentro de la primera zona de Brillouin) y, después, para cada valor de σ , es decir, para cada valor del período espacial del campo de deformación. En particular nos restringiremos al intervalo $0 \leq \sigma \leq 2$, pues el campo de deformación es periódico en σ . Una vez obtenida tal representación matricial, el espectro de energía puede ser obtenido por diagonalización numérica. Dicho espectro (como función de σ) es mostrado en la Fig. 9 para un sistema con los siguientes parámetros $\lambda = 2$ (amplitud de la deformación) y $\phi = 4\pi\sigma/3$ (fase de la deformación), además se usaron condiciones de frontera periódicas. Los colores en la Fig. 9 representan el NPR , en donde colores tendiendo al rojo representan estados altamente localizados, mientras que colores tendiendo al azul representan estados extendidos, ver la discusión

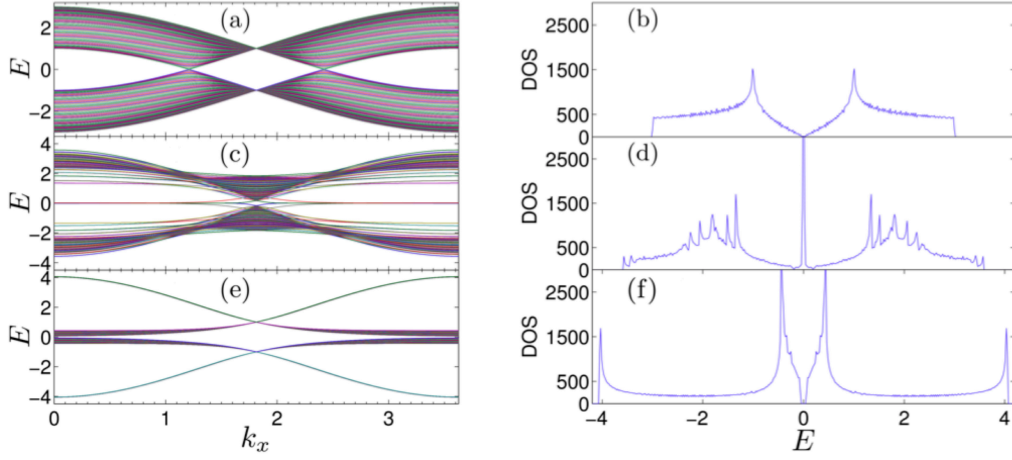


Figura 10: Estructura de bandas (panel izquierdo) y densidad de estados (panel derecho) para una ZGN con $\phi = 4\pi\sigma/3$ y $\lambda = 0$ para diferentes valores de σ . En a) y b) se usó $\sigma = 0$, es decir, es el caso de grafeno sin deformar. c) y d) se realizaron para $\sigma = 3(\sqrt{5} - 1)/8$ y, finalmente, para e) y f) se utilizó $\sigma = 3/4$. Note como aparecen estados degenerados (picos en la densidad de estados o bandas sin dispersión en la estructura de bandas) y una banda plana al nivel de Fermi para c) y d), mientras que para e) y f) se abre una brecha al nivel de Fermi.

después de que se define el NPR en la Ec. (26).

Nótese la complejidad y las características fractales del espectro presentado en la Fig. 9. También observe que el espectro está compuesto principalmente por estados altamente localizados, es decir, para un amplio rango en el intervalo de σ graficado, el sistema tiene un fuerte carácter aislante. Sin embargo, hay algunas regiones en el espectro en las que las funciones de onda son extendidas (color azul en la figura), como es de esperarse estas regiones corresponden a valores de σ cercanos al cero y dos, pues para esos casos se recupera el caso de grafeno sin deformar. Otro aspecto importante a ser notado, es el hecho de que cada vez que la frecuencia de la deformación, σ , toca un valor racional las funciones de onda se vuelven extendidas. Esto se debe a que para valores racionales de σ es posible definir una supercelda y las funciones de onda tienen una naturaleza tipo Bloch. En cambio para valores irracionales de σ no es posible tratar el sistema como en el problema de Bloch, pues el sistema se vuelve cuasi periódico. Adicionalmente, en el recuadro de la Fig. 9 puede notarse que una brecha energética se ha abierto a energía cero. Este es el resultado más importante, pues se ha predicho que no es posible abrir una brecha energética en una nanocinta de grafeno con terminación zigzag al aplicarle una deformación uniaxial uniforme a lo largo de la dirección armchair [20]. Sin embargo, como puede ser visto claramente en la Fig. 9, este resultado ya no es válido para el caso en el caso de deformaciones no uniformes.

Por otro lado, aunque el espectro de energía mostrado en la Fig. 9 es muy interesante, con el afán de obtener información sobre la física del problema y de comparar con la literatura existente, analizaremos tres valores característicos de la frecuencia del campo de deformación, a saber, i)

$\sigma = 0$ que corresponde al caso de una nanocinta de grafeno con terminación zigzag sin deformar, este caso es útil para corroborar que el algoritmo usado no tenga errores. *ii*) $\sigma = 3(\sqrt{5} - 1)/8$ que corresponde al caso en el que el período espacial de la deformación y el período de cuatro celdas de la NGZ son incommensurables entre sí, por lo que el sistema efectivo se comporta como un cuasi cristal. *iii*) el caso conmensurado, $\sigma = 3/4$, en este el sistema se comporta como un cristal modulado, como se verá más adelante. Para cada uno de los tres valores de σ anteriores se obtuvo la estructura de bandas para los siguientes valores de los parámetros del modelo $\lambda = 2$, $\phi = 4\pi\sigma/3$, además, las gráficas se obtuvieron usando condiciones de frontera periódicas. Dichas estructuras de bandas son presentadas en la Fig. 10. En el panel a) se presenta el caso $\sigma = 0$, esta panel se ha mostrado con fines de comparación pues para este caso recuperamos la estructura de bandas obtenida en la Parte I para una nanocinta con terminación zigzag. En el panel b) se muestra la densidad de estados para ese mismo caso. En los paneles c) y d) se presenta la estructura de bandas y la densidad de estados para $\sigma = 3(\sqrt{5} - 1)/8$, respectivamente. Nótese en el panel c) de la Fig. 10 que la degeneración observada en las singularidades de van Hove ($k_x = \pi/\sqrt{3}$) se ha roto y las bandas se han desdoblado. Observe, además, la banda plana que emerge a energía cero cerca de los bordes de la primera zona de Brillouin del sistema, está banda no se debe a efectos de superficie pues para la realización de la gráfica se usaron condiciones de frontera cíclicas. Todo lo anterior contribuye a que la densidad de estados tenga muchos picos, ver Fig. 10 d); volveremos sobre este punto más adelante. En los paneles e) y f) de la Fig. 10 mostramos el caso $\sigma = 3/4$. Nótese que para este caso se abre una brecha energética que, desafortunadamente, es pequeña. Dado que para $\sigma = 3/4$ el sistema se vuelve periódico no sólo en la dirección x sino también en la dirección y es posible obtener el espectro de energía de manera analítica.

Para explicar las características antes mencionadas, notemos que el Hamiltoniano efectivo (27) representa a un cuasi cristal si σ es irracional, mientras que describe a un cristal modulado para σ racional. Para el caso conmensurable, es posible obtener un super período dado por $P = 4\sigma Q$, donde Q es un entero mayor que cero. Por otro lado, para el caso en que σ es irracional, digamos, para $\sigma = 3(\sqrt{5} - 1)/8$, el período de la deformación es incommensurable con el período de cuatro sitios de la celda unitaria, por lo que el sistema se vuelve cuasi periódico. Esto implica que no es posible utilizar teoría de perturbaciones a ningún orden debido al problema de divisores pequeños debido a que el espacio recíproco está densamente poblado por picos de difracción [46]. Este hecho es importante debido a que si uno realiza un desarrollo en series de Fourier como,

$$c_{\vec{r}'} = \sum_{\vec{k}} \exp \left[\vec{k} \cdot (\vec{r}' + \vec{u}(\vec{r}')) \right] c_{\vec{k}} \quad (32)$$

donde \vec{k} es un vector del espacio recíproco es necesario considerar una contribución densamente poblada en $\sum_{\vec{k}} \exp \left[\vec{k} \cdot \vec{u}(\vec{r}') \right]$ para el caso en el que el sistema es incommensurable [46, 47]. Esto explica porque hay tantos picos en la densidad de estados para el caso en el que σ es irracional, ver Fig. 10 d). Para llamar la atención acerca de este punto es conveniente resolver un

ejemplo. Consideraremos el caso $k_x = \pi/\sqrt{3}$, pues para este caso podemos obtener el espectro de energías analíticamente independientemente del tipo de deformación aplicado, pues se tiene que $c(k_x = \pi/\sqrt{3}) = 0$ para cualquier valor de λ y σ . En este punto el sistema se desacopla en dímeros (representados por líneas sólidas en la Fig. 8), los cuales pueden describirse por medio de Hamiltonianos desacoplados de dos niveles dados por,

$$H(k_x = \pi/\sqrt{3}) = \begin{pmatrix} 0 & \gamma_{2j} \\ \gamma_{2j} & 0 \end{pmatrix}, \quad (33)$$

donde los parámetros de salto son,

$$\gamma_{2j} = 1 + \frac{2}{3}\lambda \sin(4\pi\sigma/3) \sin(4\pi\sigma j + \phi). \quad (34)$$

Los eigenvalores del Hamiltoniano (33) son muy fáciles de calcular, dichos eigenvalores están dados por $\pm\gamma_{2j}$. En el caso en el que $\sigma = 0$, es decir para una nanocinta de grafeno con terminación zigzag sin deformar, tenemos $E(k_x = \pi/\sqrt{3}) = \pm 1$. Por lo que el punto $k_x = \pi/\sqrt{3}$ corresponde al punto en el que se localizan las singularidades de van Hove, que pueden verse como los picos a energías ± 1 en la Fig. 10 b). Cada uno de estos picos tiene una degeneración de $N/2$, donde N es el número de átomos por celda unitaria. Para $\sigma = 3/4$ las singularidades de van Hove siguen degeneradas, ver Fig. 10 f). Por otro lado, para σ irracional el factor $\sin(4\pi\sigma/3)$ se vuelve un generador de números *pseudo* aleatorios en el intervalo $[-1, 1]$, ya que la función $\sin(4\pi\sigma/3)$ es cuasi periódica al evaluarse para j que únicamente toman valores enteros. Este generador actúa como un potencial perturbativo y, por lo tanto, rompe la degeneración presente en las singularidades de van Hove. De tal suerte, el espectro energético, en este punto, es puramente discreto y está contenido en los intervalos $[-1-2\lambda/3, -1+2\lambda/3]$ y $[1-2\lambda/3, 1+2\lambda/3]$ conduciendo a una brecha energética de tamaño $4\lambda\gamma_0/3$ para $\lambda < 2/3$. Este desdoblamiento puede ser visto claramente en la Fig 10 c) en el punto $k_x = \pi/\sqrt{3}$.

La discusión anterior explica por qué la densidad de estados para el caso de σ irracional tiene tantos picos, sin embargo, ¿qué pasa con la localización de las funciones de onda? Cuando σ es irracional las funciones de onda están localizadas en los dímeros en la dirección y . Sin embargo, en el caso en que σ es racional los eigenvalores de la energía están degenerados, así que cualquier combinación lineal de las funciones de onda en los dímeros es una solución, lo que conduce a estados extendidos alrededor de $k_x = \pi/\sqrt{3}$. Esto queda confirmado en la Fig. 9, pues cada vez que σ toma un valor racional aparecen franjas azules, por lo tanto, $\ln(NPr) \rightarrow -1$ lo que implica que las funciones de onda están extendidas.

3.2. Espectro de energía como función de λ

Hasta aquí se ha considerado únicamente el cambio de la energía como función del período espacial, σ , y el número de onda k_x (para σ y λ fijas), manteniendo constante uno de los parámetros

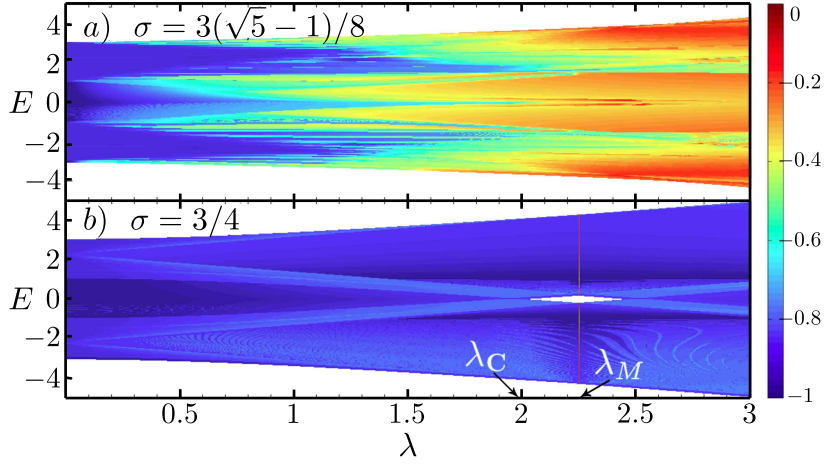


Figura 11: Espectro de energía como función de la amplitud λ para a) $\sigma = 3(\sqrt{5}-1)/8$ y b) $\sigma = 3/4$. Como puede verse en el panel a) las funciones de onda están más localizadas que b). Por otra parte, en b) se abre una brecha energética para $\lambda > \lambda_c = 9\sqrt{3}/8$. Mientras que a $\lambda = \lambda_M$ la brecha energética alcanza su valor máximo. Los diferentes colores en la figura representan el NPR . Las mismas condiciones que en la Fig. 9 fueron usadas.

más importantes de la deformación: la amplitud (λ). Para estudiar la dependencia de la energía con la amplitud de la deformación se calculó numéricamente el espectro energético como función de λ para dos valores de la frecuencia: a) $\sigma = 3(\sqrt{5}-1)/8$ y b) $\sigma = 3/4$. La Fig. 11 muestra dicho espectro, el cual fue obtenido por diagonalización numérica del Hamiltoniano (27) para 500 valores de λ , los colores en dicha figura representan el NPR . En la Fig. 11, saltan a la vista varias características importantes. Primero, en la Fig. 11 a) puede verse que las funciones de onda están muy localizadas, esto se debe a la naturaleza irracional de σ , pues, como se dijo arriba, para σ irracional las funciones de onda tienden a localizarse en los dímeros en la dirección y . Además para el caso a) no se abre ninguna brecha energética al nivel de Fermi. El caso b) es más interesante. Como se esperaba, dado que σ es racional, las funciones de onda están totalmente extendidas. Más aún, para $\lambda > \lambda_c = 9\sqrt{3}/8$ una brecha energética se abre y se observa una transición en la localización de las funciones de onda cuando $\lambda = \lambda_M = 9/4$. Adicionalmente, para este valor de λ la brecha energética toma su valor máximo. Es importante mencionar que los valores de λ a los que estos resultados son observados caen muy lejos del límite $\lambda \ll a_c$, en otras palabras, ya no es válida la aproximación de amplitudes pequeñas. Por tanto es importante encontrar el valor mínimo de la amplitud de la deformación necesario para abrir una brecha energética. Esto será hecho en lo que sigue. Procedamos a analizar con detalle el caso b), es decir, $\sigma = 3/4$.

Para comenzar nótese que al observar la estructura de bandas y la DOS para $\sigma = 3/4$ (Fig. 10 e y f) puede inferirse que el sistema se comporta de manera parecida a dos cadenas desacopladas. Lo anterior es confirmado al calcular el parámetro de salto, vía la ecuación (30), cuando $\sigma = 3/4$

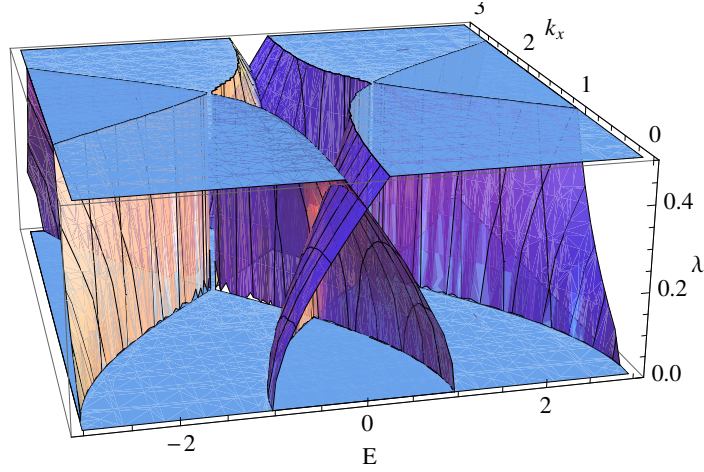


Figura 12: Bordes de banda para $\sigma = 4/3$ como función de la amplitud λ y el momento k_x . La gráfica fue generada usando la ecuación (37). Note como se abre una brecha energética al nivel de Fermi para $\lambda > \lambda_c$ (ver texto) confirmando los resultados numéricos mostrados en la Fig. 11.

y $\phi = 4\pi\sigma/3$. Para este caso el parámetro de salto resulta ser

$$t_j = 1 - \frac{8}{9}\lambda \sin(3\pi j/2). \quad (35)$$

Esto, básicamente, dice que el sistema tiene una celda de cuatro átomos que se repite en la dirección y (esta celda está indicada en la Fig. 8 con recuadros azules semi transparentes). Ahora, si se consideran condiciones de frontera cíclicas en la dirección y , la ecuación de Schrödinger para el sistema efectivo toma la siguiente forma

$$\begin{aligned} E\psi_1 &= \left(1 + \frac{8}{9}\lambda\right) c(k_x)\psi_2 + \psi_4, \\ E\psi_2 &= \psi_3 + \left(1 + \frac{8}{9}\lambda\right) c(k_x)\psi_1, \\ E\psi_3 &= \left(1 - \frac{8}{9}\lambda\right) c(k_x)\psi_4 + \psi_2, \\ E\psi_4 &= \psi_1 + \left(1 - \frac{8}{9}\lambda\right) c(k_x)\psi_3. \end{aligned} \quad (36)$$

Por lo tanto, las energías (aquí únicamente se presentan los bordes de banda) de este sistema están dadas por la solución de la ecuación (36) y tienen la forma

$$E = \pm \left(\sqrt{1 + \left(\frac{8}{3}\lambda\right)^2 \cos^2(\sqrt{3}k_x/2)} \pm 2 \cos(\sqrt{3}k_x/2) \right). \quad (37)$$

En la Fig. 12 se muestra la grafica de la ecuación (37). Como puede verse, cuando λ alcanza un valor crítico (λ_c) se abre una brecha energética al nivel de Fermi. El valor exacto de λ_c puede ser calculado de la ecuación (37) haciendo $k_x = 0$ o $2\pi/\sqrt{3}$ e igualando las dos ramas siguientes

$$E_1(k_x = 0) = \sqrt{1 + (8\lambda/3)^2} - 2, \quad E_2(k_x = 0) = -\left(\sqrt{1 + (8\lambda/3)^2} - 2\right). \quad (38)$$

Después de hacer $E_1 = E_2$ y resolver para λ se obtiene, $\lambda_c = 9\sqrt{3}/8$. Este valor coincide con el obtenido numéricamente, como puede verse en la Fig. 11. Cuando $\lambda = \lambda_M = 9/4$ la brecha energética alcanza su valor máximo, pero a $\lambda = \lambda_M/2$ nótese que uno de los parámetros de salto se hace cero (aquellas integrales de salto que tiene la forma $1 - 8\lambda/9$) de tal suerte el sistema se comporta como tiras triangulares y para $\lambda > \lambda_M/2$ esas integrales de salto toman valores negativos por lo que el sistema efectivo ya no representa, propiamente, grafeno bajo deformación.

3.3. Conclusiones

En este capítulo se analizó cómo se modifican las propiedades eléctricas de una nanocinta de grafeno con terminación *zigzag* cuando esta se somete a una deformación periódica uniaxial. Se encontró que las propiedades electrónicas dependen fuertemente de la frecuencia (σ) y la amplitud (λ) de la deformación. En especial, se notó que para σ racional el sistema se comporta como un cristal modulado, encontrándose que para $\sigma = 3/4$ y λ grande el sistema puede ser visto como tiras de celdas triangulares, esto fue confirmado numérica y analíticamente. Adicionalmente para este valor particular de σ se encontró una brecha energética cuyo tamaño puede ser modulado vía la amplitud de la deformación. Por otro lado, para σ irracional se encontró que la deformación actúa como un potencial perturbativo que desdobra el espectro cerca de $k_x = \pi/\sqrt{3}$, esto fue confirmado numéricamente. La importancia de esto radica en que la forma usual de estudiar deformación en grafeno es vía pseudo campos magnéticos usando métodos perturbativos, sin embargo, aún el caso tan sencillo estudiado aquí, para σ irracional, la teoría de perturbaciones falla debido al problema de divisores pequeños.

Muchos de los resultados aquí presentados fueron obtenidos usando amplitudes de deformación fuera de la respuesta elástica del grafeno, por lo que no pueden ser obtenidos experimentalmente en grafeno deformado pero pueden ser logrados por medio del uso de redes ópticas artificiales en las que es posible ajustar los parámetros de salto a voluntad [48, 49, 50, 51, 52, 53].

4. Nanocintas de grafeno con terminación armchair

Ya que se ha analizado el caso de una nanocinta de grafeno con terminación *zigzag* sometida a un campo de deformación uniaxial, ahora se estudiará el efecto de un campo de deformación

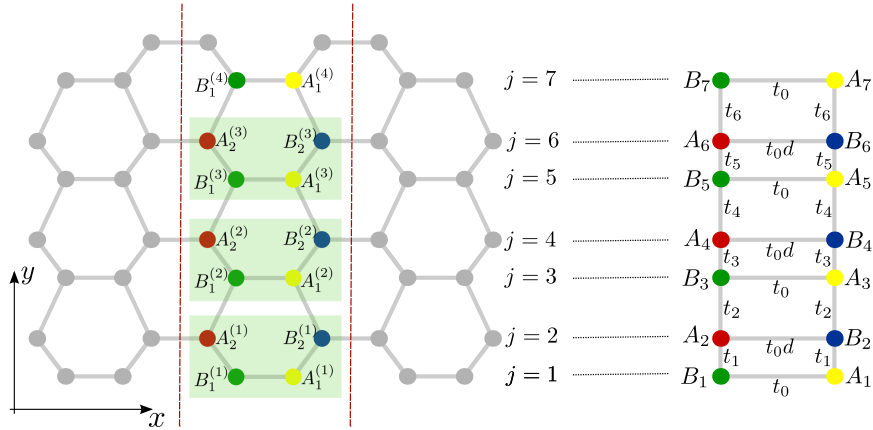


Figura 13: Mapeo de la nanocinta de grafeno hacia dos cadenas acopladas. La deformación modifica la posición de los sitios en la dirección y , mientras que, la celda unitaria está delimitada por líneas punteadas rojas. Dentro de cada celda hay cuatro átomos diferentes denotados por $A_1^{(m)}$, $A_2^{(m)}$, $B_1^{(m)}$ y $B_2^{(m)}$. El Hamiltoniano efectivo, es decir el mapeo, representa dos cadenas acopladas vía t_0 y t_0d (mostradas a la derecha) donde la etiqueta j corresponde a cada uno de los escalones en la dirección y .

similar al usado en el capítulo anterior pero ahora aplicado a una nanocinta de grafeno con terminación armchair. En el capítulo 3 encontramos que es posible abrir una brecha energética en la estructura de bandas de una nanocinta de grafeno con terminación zigzag. Sin embargo, el tamaño de dicha brecha energética resultó ser muy pequeño y se necesitaron amplitudes de deformación del orden del 20 % del parámetro de red del grafeno. Afortunadamente, es bien conocido que es posible crear brechas energéticas de manera más fácil en nanocintas de grafeno con terminación armchair sometidas a deformaciones uniaxiales uniformes [20], en este capítulo exploramos esta posibilidad pero usando una deformación uniaxial no uniforme. Más adelante veremos que es posible generar más brechas energéticas usando nanocintas de grafeno con terminación armchair sometidas a deformaciones elásticas periódicas en el espacio. Adicionalmente, también veremos que la brecha energética se abre a partir de un punto crítico en la amplitud del campo de deformación aplicado. En este punto los electrones se comportan de manera mezclada, alternando su comportamiento entre fermiones de Dirac sin masa y electrones de Schrödinger con masa. En realidad, este tipo de comportamiento ya había sido observado en grafeno cambiando los parámetros de salto del grafeno *ad hoc* [54, 55]. Aquí nosotros probamos que no es necesario modificar los parámetros de salto arbitrariamente, sino que basta con aplicar un campo de deformación muy simple. Pasemos pues al estudio de las propiedades electrónicas de una nanocinta de grafeno sometida a deformaciones mecánicas uniaxiales.

En la Parte I encontramos que es posible describir las propiedades electrónicas de una nanocinta de grafeno con terminación armchair usando un Hamiltoniano unidimensional efectivo. Este resultado sigue siendo válido para el caso en el que la nanocinta es sometida a una deformación

uniaxial que se aplica a lo largo de la dirección y y no altera la simetría traslacional a lo largo de la dirección x , dicha nanocinta deformada se muestra en la Fig. 13. Para una deformación en general el Hamiltoniano que describe tal nanocinta deformada está dado por,

$$H(k_x) = \sum_j \left[\gamma_0 \left(d(k_x) a_{2j}^\dagger b_{2j} + a_{2j+1}^\dagger b_{2j+1} \right) + \gamma_j a_j^\dagger b_{j+1} \right] + \text{h.c.}, \quad (39)$$

donde a_j , a_j^\dagger y b_j , b_j^\dagger son operadores de creación y aniquilación en las subredes A y B , respectivamente. El Hamiltoniano efectivo (39) representa dos cadenas acopladas, el acoplamiento tiene magnitud γ_0 y $\gamma_0 d(k_x)$, como se muestra en la Fig. 13. γ_j es la integral de transferencia a lo largo de las cadenas en la dirección y y están dadas por la Ec. (25). Al igual que en el capítulo anterior, nos enfocaremos en el caso de deformación uniaxial periódica en el espacio. En particular, consideraremos el siguiente campo de deformación,

$$u(y_j) = \frac{\lambda}{\sqrt{3}\beta} \cos \left[\frac{4\pi\sigma}{\sqrt{3}} \left(y_j - \sqrt{3}/4 \right) + \phi \right], \quad (40)$$

donde λ es la amplitud, σ es la frecuencia y ϕ es la fase de la deformación. Como antes, la forma específica de la deformación fue elegida de tal forma que los parámetros de salto tomen la forma más simple posible una vez que la ecuación de Schrödinger correspondiente ha sido obtenida. La componente y de las posiciones de los átomos de carbono dentro de la celda unitaria de una NGA (ver Fig. 6) sin deformar, y_j , puede ser escrita como,

$$y_j = \sqrt{3}a_c(j-1)/2 \quad (41)$$

Para el campo de deformación dado por la Ec. (40) los parámetros de salto, en la aproximación de amplitudes de deformación pequeñas, pueden ser escritos como,

$$t_j = 1 + \lambda \sin(\pi\sigma) \sin(2\pi\sigma j + \phi). \quad (42)$$

La ecuación anterior ha sido obtenida sustituyendo el campo de deformación Ec. (40) en la Ec. (25) y usando la componente y de las posiciones de los átomos en la celda unitaria de una nanocinta con terminación armchair dada por la Ec. (41). Al igual que el capítulo anterior (donde se trató el caso de una nanocinta de grafeno deformada uniaxialmente), los parámetros de salto son muy similares a los que aparecen en el problema de Harper [44], por lo tanto, se espera que el espectro de energía sea muy complejo y que exhiba una naturaleza fractal. Como se verá abajo este será el caso.

4.1. Espectro de energía como función de σ y λ

Ya que se ha definido el Hamiltoniano efectivo, Ec. (39), toca el turno de obtener el espectro de energía como función de σ para una λ fija. Esto puede ser hecho por medio de la diagonalización

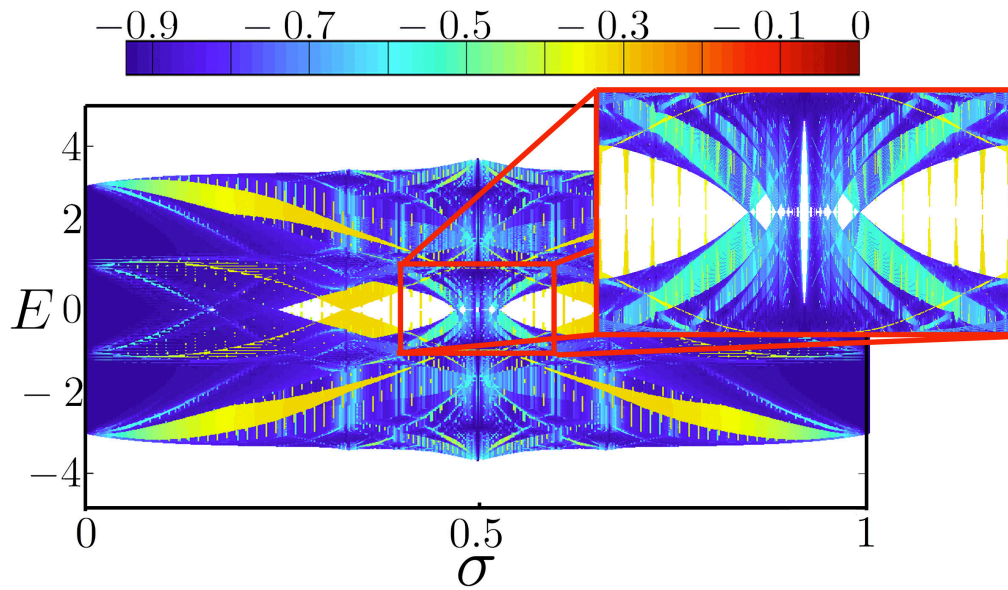


Figura 14: Espectro de energía como una función de σ para $\lambda = 1$ y $\phi = \pi\sigma$ obtenido por medio de la diagonalización numérica de la representación matricial del Hamiltoniano (39) para un sistema de $N = 160$ átomos por celda unitaria, barriendo 250 puntos en k_x y usando condiciones de frontera fijas. Los colores representan el NPR . En el recuadro se muestra un acercamiento alrededor de $\sigma = 1/2$ y $E = 0$. Como puede verse una brecha energética de tamaño considerable se abre cuando $\sigma = 1/2$.

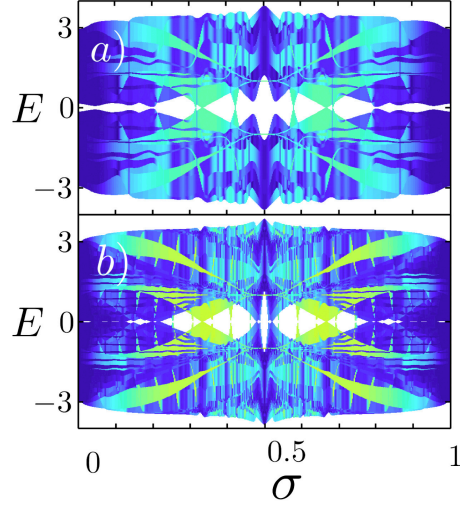


Figura 15: Espectro de la energía como una función de σ para $\lambda = 1$ obtenido mediante la resolución de la ecuación de Schrödinger (??) para un sistema con (a) 20 átomos y (b) 40 átomos por celda unitaria, usando 250 puntos para barrer k_x y con condiciones de frontera fijas. Los colores representan el logaritmo de la NPr .

numérica de la representación matricial del Hamiltoniano (39) para cada valor de k_x dentro de la primera zona de Brillouin. Esto se hace entonces para cada valor de la frecuencia de la deformación (σ) dentro del intervalo dado por $0 \leq \sigma \leq 1$, pues el campo de deformación Ec. (40) es periódico en σ . En la Fig. 14 mostramos el espectro de energía como función de σ obtenido como se mencionó anteriormente usando condiciones de frontera periódicas. Los valores de los parámetros usados son los siguientes, $\lambda = 1$ y $\phi = \pi\sigma$ para una nanocinta con $N = 160$ átomos por celda unitaria. Los colores usados en dicha figura representan el logaritmo del inverso de la razón de participación normalizada (NPR), ver la Ec. (26) y la discusión que aparece después de dicha ecuación. El color azul indica estados completamente extendidos, mientras que el rojo representa estados totalmente localizados cerca de los bordes de la nanocinta en consideración. Uno puede mencionar varias características interesantes del espectro energético mostrado en la Fig. 14. Primero, observe que las funciones de onda para este caso están mucho menos localizadas que en el caso de una nanocinta deformada de grafeno con terminación zigzag, ver Fig. 9. Segundo, el espectro tiene un fuerte carácter fractal, ver el recuadro en la Fig. 14. Tercero y último, el espectro tiene brechas energéticas al nivel de Fermi que son más abundantes y de mayor tamaño que las observadas en su contraparte zigzag (ver Fig. 9). En particular, para $\sigma = 1/2$ se abre la brecha energética de mayor tamaño. Como veremos más adelante este caso puede ser resuelto analíticamente.

Además de la dependencia del espectro energético en los parámetros del campo de deformación, las propiedades electrónicas de la NGA también dependen fuertemente de su tamaño, es

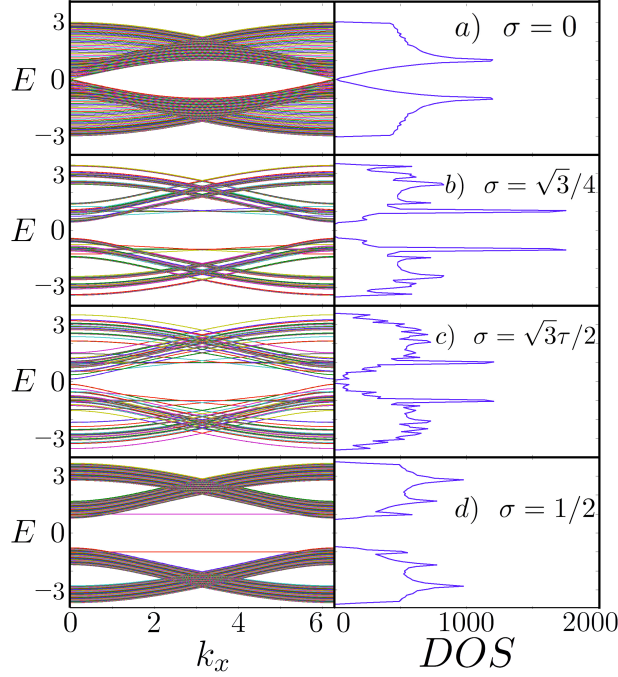


Figura 16: Estructura de bandas (panel derecho) y densidad de estados (panel izquierdo) usando $\phi = \pi\sigma$ y $\lambda = 1$ para (a) grafeno sin deformar, (b) $\sigma = \sqrt{3}/4$, (c) $\sigma = \sqrt{3}(\sqrt{5} - 1)/4$ y (d) $\sigma = 1/2$. Se usaron condiciones de frontera fijas para realizar las gráficas.

decir, del número de átomos por celda unitaria N . Para evidenciar el efecto del tamaño en el espectro energético, en la Fig. 15 se presentan los espectro de energía para distintos valores N . En específico se consideran los casos a) $N = 20$ y b) $N = 40$. El efecto más notorio del tamaño de la muestra en el espectro de energía es el agrandamiento de las brechas energéticas. Esto se debe, básicamente, a un efecto de confinamiento, ver, por ejemplo, las referencias [23, 56]. Además del ensanchamiento de las brechas energéticas, también se observan ciertas fluctuaciones en la energía en los bordes del espectro energético, esto es un efecto del tamaño finito de la nanocinta [23].

Para lograr un mejor entendimiento físico del espectro de energía mostrado en la Fig. 14, al igual que como se hizo en el caso zigzag, estudiaremos la estructura de bandas para algunos valores característicos de la frecuencia de la deformación. En particular se consideraran los siguientes valores, *i*) $\sigma = 0$ para fines de comparación. *ii*) $\sigma = \sqrt{3}/4$ que es un caso irracional para el que se abre una brecha energética, *iii*) $\sigma = \sqrt{3}(\sqrt{5} - 1)/4$ que es un caso irracional sin brecha energética y, finalmente, *iv*) el caso racional $\sigma = 1/2$, para el cual se observa la apertura de una gran brecha energética al nivel de Fermi. Tales estructuras de bandas y sus respectivas densidades de estados se muestran en la Fig. 16, dichas estructuras de banda y densidades de estado fueron obtenidas para $\lambda = 1$, $\phi = \pi\sigma$ y usando condiciones de frontera fijas. Ahora analicemos las principales

características de dicha figura. Dado que ya hemos analizado antes el caso de la nanocinta sin deformar y el caso en el que la frecuencia de la deformación es irracional, únicamente se analizará el caso $\sigma = 1/2$ que se muestra en el panel d) de la Fig. 16; para mayores detalles acerca de los otros casos ver el capítulo 3. Al observar la densidad de estados de dicho caso, podemos conjeturar que para $\sigma = 1/2$ el sistema se comporta efectivamente como dos cadenas desacopladas. En realidad, como veremos más adelante, este resulta ser el caso. Es importante señalar que el sistema no se desacopla en las ‘escaleras’ dadas por la celda unitaria del sistema pues dichas ‘escaleras’ están acopladas via γ_0 y $\gamma_0 d(k_x)$, los cuales nunca se hacen cero. En realidad el sistema se desacopla a lo largo de la dirección x debido a que para $j \neq 0$ el parámetro de salto puede anularse, lo que conduce al desacoplamiento del sistema en cadenas unidimensionales infinitas a lo largo de la dirección x , esto tendrá implicaciones fuertes en el comportamiento efectivo de los electrones en la nanocinta como veremos más adelante. Adicionalmente, nótese los bandas casi planas que aparecen en la estructura de bandas, las cuales están localizadas cerca de los bordes y aparecen a energías ± 1 . Tales bandas localizadas pueden ser entendidas como remanentes de las singularidades de van Hove.

Al igual que en el capítulo anterior, hemos observado una brecha energética en el espectro de energía sin embargo esto se observó para $\lambda = 1$, que cae, por mucho, fuera del límite de amplitudes de deformación pequeñas. Por lo tanto, es importante obtener el valor mínimo de la amplitud de la deformación para abrir una brecha energética en la estructura de bandas de la nanocinta para el caso $\sigma = 1/2$. Esto puede ser hecho estudiando el espectro de energía como función de la amplitud de la deformación, λ , para diferentes valores de σ . Dicho espectro es mostrado en la Fig. 17 para a) $\sigma = \sqrt{3}/4$, b) $\sigma = \sqrt{3}(\sqrt{5} - 1)/4$ y c) $\sigma = 1/2$. Ahí puede verse que la brecha energética no se abre únicamente para valores racionales de la deformación sino también para valores irracionales. Sin embargo, con el fin de realizar cálculos analíticos, únicamente analizaremos el caso racional. Para ese caso, puede verse en la Fig. 17 c) que para $\lambda > \lambda_c = 1/2$ se abre una brecha energética. Además, también se observan los estados de borde a energías $\pm\gamma_0$ en el panel c) de la Fig. 17. Dichos estados están localizados cerca de los bordes de la nanocinta. En lo que sigue estudiaremos analíticamente el caso $\sigma = 1/2$ para mostrar de donde viene el valor obtenido de λ_c .

4.2. Caso $\sigma = 1/2$: Fermiones de Schrödinger y de Dirac

Para este valor de σ , los parámetros de salto Ec. (42) toman la siguiente forma,

$$t_j = 1 + (-1)^j \lambda. \quad (43)$$

Esto implica que el sistema efectivo ahora es periódico no sólo en la dirección x sino también en la dirección y . En otras palabras, la celda unitaria del sistema puede ser dividida en celdas más pequeñas, cada una de las cuales está compuesta por cuatro átomos distintos. Por lo tanto, como consecuencia del teorema de Bloch, es posible definir el cuasi momento a lo largo de la dirección y

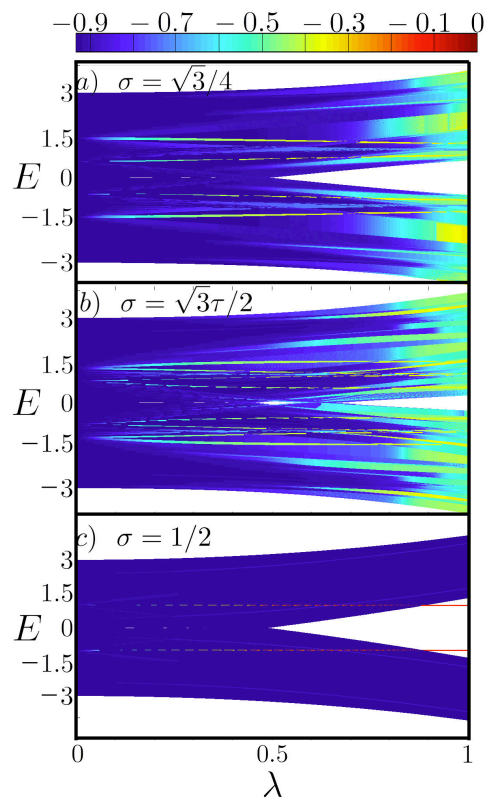


Figura 17: Espectro de energía como función de la amplitud λ para a) $\sigma = \sqrt{3}/4$, b) $\sigma = \sqrt{3}(\sqrt{5} - 1)/4$ y c) $\sigma = 1/2$. Puede verse que para el caso c) una brecha energética se abre para $\lambda > 1/2$. Para realizar las gráficas se usaron condiciones de frontera fijas.

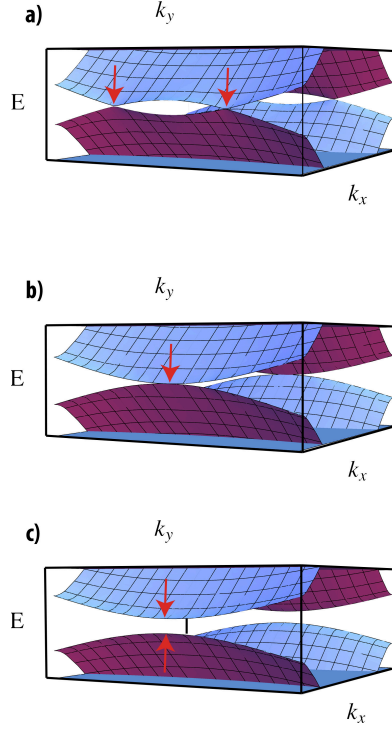


Figura 18: Evolución de la superficie de la energía como una función de k_x y k_y para $\sigma = 1/2$ en las cercanías de λ_c . En a) $\lambda = 0,9\lambda_c$, en b) $\lambda = \lambda_c$ y en c) $\lambda = 1,1\lambda_c$. En el caso a) se observan dos conos de Dirac, los cuales se fusionan en el caso b), mientras que en el caso c) desaparecen. Las flechas indican la posición del nivel de Fermi.

(esto únicamente es posible si establecemos una condición de frontera cíclica ficticia a lo largo de la dirección y), que denotaremos por k_y . De tal suerte, las funciones de onda del sistema pueden ser escritas como,

$$\vec{\Psi}(\vec{r}) = \exp(ik_x x) \exp(ik_y y) \psi_i(j), \quad (44)$$

donde $j = 1, 2$. Los valores propios de la energía pueden ser encontrados al escribir la representación matricial del Hamiltoniano (39), que, para este caso, resulta ser una matriz 4×4 , cuyos eigenvalores, como función de λ , k_x y k_y , son

$$E_{\pm, \pm} = \pm \sqrt{\mp \sqrt{-(1 + \cos(k_x)) g(\lambda, k_y)} \mp (-1 - 2g(\lambda, k_y))} \quad (45)$$

con

$$g(\lambda, k_y) = -1 - \lambda^2 + (\lambda^2 - 1) \cos(\sqrt{3}k_y/2). \quad (46)$$

Ahora, ya que hemos obtenido la forma analítica del espectro de energía, podemos calcular el valor mínimo de la amplitud de la deformación (λ) necesario para abrir una brecha energética al

nivel de Fermi en la estructura de bandas. Para hacer esto, basta con minimizar el cuadrado de la energía dada por la Ec. (45). Esto es posible debido a que el espectro es simétrico con respecto a la línea $E = 0$. Uno encuentra que los valores del cuasi momento que minimizan la expresión (45) son $k_x = 2n\pi$ y $k_y = 2\pi(2n + 1)/\sqrt{3}$. Del resultado anterior se sigue que el tamaño de la brecha energética, en las cercanías de los puntos $k_x = 2n\pi$ y $k_y = 2\pi(2n + 1)/\sqrt{3}$, está dada por,

$$\Delta = 4(\lambda - 1/2). \quad (47)$$

Es evidente que el tamaño de la brecha energética al nivel de Fermi crece linealmente con la amplitud de la deformación. El mecanismo por el cual la brecha energética se abre en nuestro caso es igual al mecanismo que abre una brecha energética al aplicar deformación uniaxial uniforme a lo largo de la dirección zigzag a una hoja de grafeno infinita [20]. En resumidas cuentas lo que pasa es lo siguiente, como vimos anteriormente cuando uno estira la nanocinta de grafeno con terminación armchair en la dirección zigzag, lo que uno hace es inducir a los electrones a moverse a lo largo de trayectorias unidimensionales, es decir, los electrones están confinados a moverse en una dimensión. Esto se debe a que el sistema comienza, para $\lambda > \lambda_c$, a desacoplarse en cadenas unidimensionales infinitas que yacen a lo largo de la dirección x de la nanocinta, ver Fig. 13. Desde el punto de vista del espacio recíproco, lo que pasa es que la deformación produce modificaciones en la red recíproca del sistema. Al estirar la nanocinta con terminación armchair a lo largo de la dirección zigzag, en el espacio recíproco, dos conos de Dirac comienzan a acercarse¹¹. Si continuamos aplicando aún mas tensión a lo largo de la dirección zigzag, los conos de Dirac eventualmente se fusionarán [20]. El valor crítico de la amplitud de la deformación al cual los conos de Dirac se fusionan, denotemos ese punto como λ_c , puede ser obtenido calculando la amplitud para la cual el tamaño de la brecha energética es cero [esto se puede hacer de manera muy fácil usando la Ec. (47)], uno encuentra que dicho valor es $\lambda_c = 1/2$. Si seguimos jalando la nanocinta, de tal forma que la amplitud de la deformación sea mayor que λ_c , se abrirá una brecha energética al nivel de Fermi. Así, hemos observado la transición de una fase semimetálica a una fase aislante de una nanocinta de grafeno inducida por una deformación mecánica, la cual es controlada al ir de una amplitud $\lambda = 0$, a $\lambda = \lambda_c$ y, finalmente, a $\lambda > \lambda_c$; en la Fig. 18 mostramos estos tres momentos de la transición semimetal-aislante antes mencionada.

Hasta ahora hemos encontrado el valor mínimo de la amplitud de deformación necesario para obtener una brecha energética al nivel de Fermi en la estructura de bandas. Sin embargo, ¿qué tiene que ver esto con el título de la presente sección?. Bueno, resulta que en el punto crítico, es decir en $\lambda = \lambda_c$, pasa algo muy peculiar. Justo en el punto $\lambda = \lambda_c$ los electrones del grafeno siguen dos tipos de comportamientos dependiendo de la dirección en la que se muevan en el

¹¹Por el contrario, si uno aplica una deformación uniaxial uniforme a lo largo de la dirección armchair a una hoja infinita de grafeno, lo que sucede en el espacio recíproco es que los conos de Dirac comienzan a separarse, de tal suerte, para ese caso, es prácticamente imposible abrir una brecha energética en la estructura de bandas del grafeno [20].

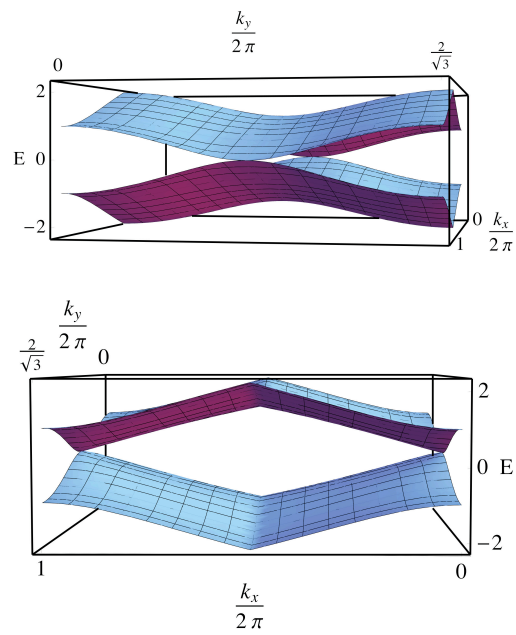


Figura 19: Superficies de la energía como función de k_x y k_y para $\lambda = 1/2$ y $\sigma = 1/2$, desde diferentes perspectivas, usando la versión lineal de t_j . Nótese como los electrones tienen un comportamiento mezclado tipo Schrödinger con otro tipo Dirac al nivel de Fermi, es decir, $E = 0$.

espacio recíproco. Dichos comportamientos se muestran en la Fig. 19. Observe como a lo largo de la dirección k_x , en las cercanías del cono de Dirac, la relación de dispersión es lineal. Este hecho puede ser corroborado analíticamente al realizar un desarrollo en series de Taylor alrededor de $k_y = 2\pi(2n + 1)/\sqrt{3}$ (n es un número entero) para la energía del sistema dada por la Ec. (45). Después de algunos cálculos sencillos, uno obtiene,

$$E_{\pm} = \pm k_x/2, \quad (48)$$

cada una de estas energías está doblemente degenerada. Esto implica que los electrones se comportan como fermiones de Dirac sin masa cuando se mueven en la dirección k_x . Por otro lado, si nos fijamos en lo que pasa en las cercanías del cono de Dirac pero a lo largo de la dirección k_y , lo que se observa es que para este caso la relación de dispersión sigue una relación cuadrática, para comprobar este hecho hagamos lo que hicimos arriba: un desarrollo en series de Taylor para la energía Ec. (45) alrededor del punto $k_x = 0$. Después de algunos cálculos algebraicos, uno obtiene un comportamiento cuadrático,

$$E_{\pm} = \pm \frac{9}{32} \left(k_y - \frac{2\pi}{\sqrt{3}}(2n + 1) \right)^2. \quad (49)$$

Al igual que antes n es un número entero. Por lo tanto, los electrones se comportan como electrones con masa si se mueven a lo largo de la dirección k_y . Luego, uno tiene un comportamiento mezclado de electrones tipo fermiones de Dirac sin masa y otro de electrones de Schrödinger dependiendo de la dirección que sigan en el espacio recíproco.

Para terminar la sección, analizaremos con mayor detalle el mecanismo por medio del cual la brecha energética es abierta al aplicar un campo de deformación uniaxial a lo largo de la dirección zigzag a una nanocinta de grafeno con terminación armchair. Para hacer esto consideraremos dos casos límites, a saber, $\lambda = 0$ (grafeno sin deformar) y $\lambda = 1$ [cadenas unidimensionales a lo largo de la dirección x , según indican los parámetros de salto dados por la Ec. (43) en el límite de amplitudes de deformación pequeñas]. Si se comienza con el caso $\lambda = 0$ tenemos grafeno sin deformar y los electrones se comportan totalmente como fermiones de Dirac de masa cero. Si ahora se hace $\lambda = 1$, se sigue que $\gamma_j = 0$ por lo que el sistema se desacopla en la dirección y . En consecuencia el sistema efectivo resulta estar formado por nanocintas de dos átomos de grosor a lo largo de la dirección x . De tal suerte, las partículas siguen un comportamiento tipo cadena lineal, es decir, un comportamiento tipo Schrödinger. Conforme λ disminuye, las cadenas paralelas comienzan a interactuar débilmente, como se puede inferir de la DOS presentada en la Fig. 16 d) que es muy similar a la de dos cadenas lineales interactuando débilmente. Así, este punto crítico separa dos regiones de dimensión efectiva diferente. Una de ellas es mayormente bidimensional mientras que en la otra la propagación es básicamente unidimensional, esto resulta en dos comportamientos diferentes: por un lado se observan fermiones de Dirac y en el otro fermiones tipo Schrödinger.

4.3. Conclusiones

En este capítulo se encontró un mapeo exacto del Hamiltoniano de una AGN bajo cualquier deformación uniaxial hacia un Hamiltoniano efectivo 1D. Como en el caso de zigzag se encontró un espectro complejo de naturaleza fractal, este hecho puede ser explicado de la misma manera en que se hizo en el caso zigzag. También se observó que el caso armchair produce brechas energéticas de mayor tamaño que el caso zigzag. El estudio detallado del caso $\sigma = 1/2$ develó la existencia de un punto crítico en la amplitud λ para la apertura de brechas energéticas. En este punto crítico los electrones exhiben un comportamiento mezclado de fermiones de Dirac sin masa y fermiones tipo Schrödinger. Se demostró que este comportamiento es el resultado del cambio de la dimensión efectiva del sistema.

Nanocintas de grafeno deformadas fuera del plano

En los dos capítulos anteriores (capítulos 3 y 4) hemos descrito cómo se modifican las propiedades electrónicas de nanocintas de grafeno con terminación armchair y zigzag cuando son sometidas a deformaciones mecánicas uniaxiales dentro del plano, es decir, hemos considerado deformaciones que no inducen corrugaciones o dobleces en las nanocintas. Sin embargo, las deformaciones que no inducen corrugaciones ni dobleces en el grafeno son difíciles de obtener experimentalmente debido a que cuando el grafeno es sometido a deformaciones en el plano tiende a corrugarse o doblarse, incluso, si la deformación es grande, el grafeno puede llegar a tener fallas mecánicas [28]. Por tal motivo, en este capítulo estudiaremos deformación fuera del plano, específicamente se considerará el caso de deformación uniaxial periódica (de forma sinusoidal) en el espacio en nanocintas de grafeno con terminación armchair y zigzag. Este tipo de deformación ha sido observada en algunos experimentos, en los que se crece grafeno sobre algún sustrato con parámetro de red diferente al del grafeno. Al hacer esto, se induce un campo de deformación que es uniaxial y sigue un patrón sinusoidal [43]. En los siguientes capítulos (capítulos 5 y 6) estudiaremos cómo es que se modifican las propiedades de nanocintas de grafeno en presencia de corrugaciones uniaxiales por medio de un Hamiltoniano de amarre fuerte. Una vez que hayamos obtenido el Hamiltoniano de amarre fuerte, el siguiente paso es estudiar el efecto de corrugaciones periódicas uniaxiales. Como veremos, las características encontradas son muy similares a las observadas en los capítulos 3 y 4. Aunque para los casos aquí estudiados fuimos capaces de obtener de manera analítica las eigenenergías del sistema para varios valores de los parámetros del campo de deformación, es decir, de la amplitud y la frecuencia de la deformación.

Al igual que antes comenzaremos describiendo cómo es que la deformación fuera del plano modifica los parámetros de salto que aparecen en el Hamiltoniano de amarre fuerte. Así, lo primero que se hará es presentar resultados generales que nos serán útiles cuando analicemos un tipo particular de nanocinta de grafeno y un patrón de deformación uniaxial específico. Supongamos que tenemos una nanocinta de grafeno (por el momento el tipo de terminación no es importante) sin deformar y aplicamos una deformación que induce una corrugación a lo largo de la dirección y de la nanocinta, digamos que el campo de deformación es una corrugación que puede ser escrita

como $z(\vec{r})$, donde $\vec{r} = (x, y, 0)$ son las posiciones de los átomos en grafeno sin deformar. Debido a que este tipo de deformación mueve a los átomos fuera del plano de la hoja de grafeno sin deformar, las posiciones de tales átomos ahora están dadas por,

$$\vec{r}' = (\vec{r}, z(\vec{r})), \quad (50)$$

donde $\vec{r} = (x, y, 0)$ son las coordenadas de los átomos de carbono en la nanocinta sin deformar y $z(\vec{r})$ es la altura de tales átomos en términos de las posiciones \vec{r} . Como ya fue mencionado, las propiedades eléctricas del grafeno están bien descritas por el Hamiltoniano de amarre fuerte definido en la Ec. (19), el cual tiene la siguiente forma,

$$H = - \sum_{\vec{r}', n} \gamma_{\vec{r}', \vec{r}'} c_{\vec{r}'+\vec{\delta}'_n} c_{\vec{r}'}^\dagger + \text{h.c.},$$

pero ahora las integrales de salto $\gamma_{\vec{r}', \vec{r}'+\vec{\delta}'_n}$, tienen que modificarse que tomen en cuenta los efectos de la deformación fuera del plano. Por otro lado, $\vec{\delta}'_n$ son los vectores que unen a un átomo de carbono con sus tres primeros vecinos en la red deformada, para el caso de grafeno puro, se sigue que $\vec{\delta}'_n = \delta_n$, con δ_n definido como en la ecuación (2). El parámetro de salto depende de los parámetros del campo de deformación, al igual que antes, pero dado que la corrugación se encuentra fuera del plano, un nuevo efecto tiene que ser tomado en cuenta, a saber, el cambio en la orientación relativa de los orbitales π . Dicho efecto y el cambio en las distancias interatómicas puede ser tomado en cuenta usando la siguiente expresión para la integral de salto [57, 22],

$$\gamma_{\vec{r}', \vec{r}'+\vec{\delta}'_n} = \gamma_0 \left[1 + \alpha (1 - \hat{N}_{\vec{r}'} \cdot \hat{N}_{\vec{r}'+\vec{\delta}'_n}) \right] \exp \left[-\beta \left(\delta l_{\vec{r}'+\vec{\delta}'_n} / a_c - 1 \right) \right], \quad (51)$$

donde $\hat{N}_{\vec{r}'}$ es el vector unitario normal a la superficie de la nanocinta de grafeno deformada en el punto \vec{r}' y está dado por,

$$\hat{N}_{\vec{r}'} = \frac{\hat{z} - \nabla z(\vec{r}')}{\sqrt{1 + [\nabla z(\vec{r}')]^2}}, \quad (52)$$

$\nabla = (\partial_x, \partial_y)$ es el operador gradiente bidimensional (2D), mientras que \hat{z} es un vector unitario perpendicular al plano de la nanocinta de grafeno sin deformar. $\delta l_{\vec{r}'+\vec{\delta}'_n}$ es el cambio en la distancia entre átomos definida en la ecuación (21) y $\alpha \approx 0,4$ es una constante que toma en cuenta el cambio de la orientación relativa de los orbitales π [22]. Finalmente, $\beta \approx 3,37$ y $\gamma_0 \approx 2,7$ eV, como ya se ha dicho antes. Es importante mencionar que las contribuciones de los términos que contienen β se deben a cambios de la distancia entre los átomos, mientras que los términos que contienen α se deben al cambio en la orientación relativa de los orbitales π . En consecuencia, como se verá más adelante, los términos dependientes de β tienden a ensanchar el espectro energético y los términos dependientes de α tienden a estrecharlo.

Ya que se ha presentado el modelo en general, es momento de particularizarlo para el caso de deformación uniaxial. Si el campo de deformación es uniaxial, digamos, $z(\vec{r}) = z(y)$, los parámetros de salto toman la siguiente forma,

$$\gamma_j = \gamma_0 \left[1 + \alpha \left(1 - \hat{N}_j \cdot \hat{N}_{j+1} \right) \right] \exp \left[-\beta \left(\delta l_{j,j+1} / a_c - 1 \right) \right] \quad (53)$$

donde

$$\delta l_{j,j+1} = \sqrt{a_c^2 + [z(y_{j+1}) - z(y_j)]^2} \quad (54)$$

es la distancia entre los átomos en las posiciones y_{j+1} y y_j , cuya forma específica depende del tipo de nanocinta en consideración. $j = 1, 2, \dots, N$ etiqueta los sitios a lo largo de la posición y en grafeno sin deformar dentro de la celda unitaria de la nanocinta. Finalmente,

$$\hat{N}_j = \frac{\hat{z} - \nabla z(y_j)}{\sqrt{1 + [\nabla z(y_j)]^2}}. \quad (55)$$

Para concluir, definiremos el tipo de deformación que será utilizado para ambos tipos de nanocintas, dicha deformación está dada por la siguiente expresión,

$$z(y) = \lambda \cos(2\pi\sigma y + \phi). \quad (56)$$

Como antes, esta corrugación está modulada por tres parámetros: longitud de onda (σ), amplitud (λ) y fase (ϕ). La amplitud λ corresponde a la máxima altura alcanzada por las corrugaciones de la hoja de grafeno. Ya que se ha definido el campo de deformación a ser usado, en lo que sigue estudiaremos los efectos de este tipo de deformación en las propiedades electrónicas de nanocintas de grafeno con terminación zigzag y armchair.

5. Nanocintas de grafeno con terminación armchair

Si aplicamos una corrugación como la definida en la ecuación (56) a una nanocinta de grafeno con terminación armchair, los parámetros de salto, Ec. (53), toman la siguiente forma,

$$\gamma_j = \gamma_0 \left[1 + \alpha \left(1 - \hat{N}_j \cdot \hat{N}_{j+1} \right) \right] \times \exp \left\{ -\beta \left[\sqrt{1 + 4\lambda^2 \sin^2 \left(\sqrt{3}\pi\sigma/2 \right) \sin^2 \left[\sqrt{3}\pi\sigma(j + 1/2) + \phi \right]} - 1 \right] \right\}. \quad (57)$$

donde $\hat{N}_j = \hat{N}(y_j)$ está definido como en la Ec. (55), con las posiciones y_j dadas por la Ec. (41).

De manera similar a como hemos hecho en los capítulos 3 y 4, primero analizaremos el espectro de energía como función de la frecuencia del campo de deformación, σ , manteniendo los demás

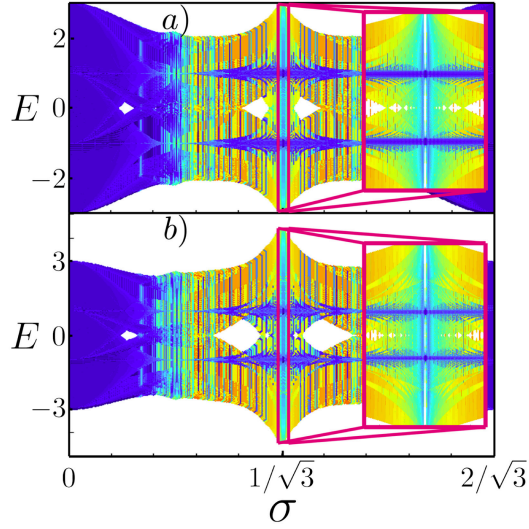


Figura 20: Espectro de energía para una NGA como función de σ calculado para $\lambda = 0,8$ con $\phi = 0$, $N = 120$ sitios, usando a) $\alpha = 0$ y b) $\alpha = 0,4$ e imponiendo condiciones de frontera periódicas. En los recuadros se presenta un acercamiento alrededor de la energía de Fermi y $\sigma = 1/\sqrt{3}$. Los colores representan el logaritmo de la NPr . Nótese que la similitud entre los dos espectros a pesar de que el valor de α es distinto para ambos.

parámetros constantes. Hacemos esto así porque este tipo de análisis arroja luz acerca de los valores de σ para los cuales se observan brechas energéticas al nivel de Fermi. Dicho espectro se presenta en la Fig. 20, la cual fue obtenido por medio de la diagonalización numérica del Hamiltoniano (39) usando los parámetros de salto dados por la Ec. (57) para $\lambda = 0,8$, $\phi = 0$, $N = 400$ sitios y usando condiciones de frontera periódicas. El panel a) fue obtenido para $\alpha = 0$, mientras que el panel b) para $\alpha = 0,4$. Los colores en la Fig. 20 representan el logaritmo del inverso de la razón de participación normalizada, ver ecuación (26). Básicamente, los colores tendiendo al rojo indican que la función de onda está altamente localizada en las cercanías de los bordes de la nanocinta, mientras que colores tendiendo al azul corresponden a funciones de onda totalmente extendidas. Observe que, tanto para la Fig. 20 a) como para el panel b) de la misma figura, el espectro de energía es muy similar al observado en el caso de una nanocinta de grafeno con terminación armchair deformada en el plano de dicha nanocinta. Por otro lado, con el fin de dilucidar el efecto del cambio de la orientación relativa de los orbitales π en el espectro de energía, en la Fig. 20 se presenta el espectro de energía para dos valores de α , a saber, a) $\alpha = 0$ y b) $\alpha = 0,4$. Es fácil notar que ambos espectros tienen la misma estructura independientemente del valor de α . El efecto más importante de los términos que contienen α es el ensanchamiento del espectro de energía. Este efecto es especialmente notorio alrededor de $\sigma = 1/\sqrt{3}$.

Para entender el origen de este hecho, es útil estudiar cómo cambia la estructura de bandas a medida que σ incrementa desde $\sigma = 0$ hasta $\sigma = 1/\sqrt{3}$. En la Fig. 21 mostramos dichas

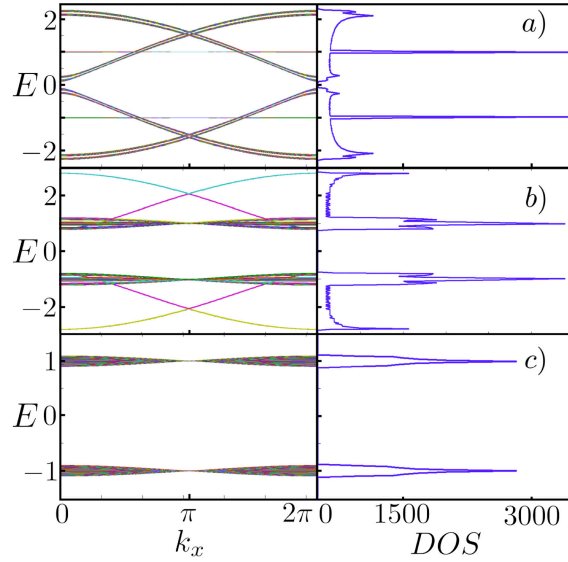


Figura 21: Estructura de bandas y densidad de estados de una NGA para $\lambda = 0,8$, $\phi = 0$ calculada para diferentes valores de σ : a) $\sigma = 0,6/\sqrt{3}$, b) $\sigma = 0,8\sigma/\sqrt{3}$ y c) $\sigma = 1/\sqrt{3}$. Estos cálculos fueron realizados para un sistema con $N = 120$ sitios por celda unitaria y se impusieron condiciones de frontera periódicas. Nótese las grandes brechas energéticas que se abren en los casos b) y c).

estructuras de bandas para a) $\sigma = 0,6/\sqrt{3}$, b) $\sigma = 0,8/\sqrt{3}$ y c) $\sigma = 1/\sqrt{3}$ con $\lambda = 0,8$ y $\phi = 0$. Si vamos desde $\sigma = 0$ hasta $\sigma = 1/\sqrt{3}$, el sistema efectivo va desde grafeno sin corrugar hasta dimeros débilmente acoplados. Estos dimeros están compuesto por un par de átomos de carbono unidos por un enlace horizontal de valor γ_0 y $d(k_x)\gamma_0$, como se muestra en la Fig. 13. La aparición de los dimeros resulta del hecho de que cuando $\sigma = 1/\sqrt{3}$ el parámetro de salto se vuelve $\gamma_j = 0,05\gamma_0 \ll \gamma_0$ para $\lambda = 0,8$ y $\alpha = 0,4$ (como se verá en la siguiente sección), en consecuencia, el sistema efectivo puede ser pensado como formado por dimeros interactuando débilmente vía γ_j . Debido a esto se espera que las energías $E = \pm\gamma_0$ estén altamente degeneradas, lo que se confirma en la Fig. 21 a). De eso se sigue que el efecto de la corrugación, especialmente de α , es ensanchar el espectro en el intervalo $(\pm\gamma_0 - \gamma_j, \pm\gamma_0 + \gamma_j)$. Conforme $\sigma \rightarrow 0$, los dimeros evolucionan en las singularidades de van Hove en $E = \pm\gamma_0$. Para confirmar que esta conjetura es correcta es conveniente resolver analíticamente el caso $\sigma = 1/\sqrt{3}$. Esto será hecho en la siguiente sección.

5.1. Caso conmensurable: $\sigma = 1/\sqrt{3}$

Para $\sigma = 1/\sqrt{3}$, los valores propios del Hamiltoniano (39) pueden ser calculados de manera analítica, pues los parámetros de salto pueden ser escritos como,

$$\gamma_j = \gamma_a(\lambda) = \gamma_0 \exp \left[-\beta \left(\sqrt{1 + 4\lambda^2} - 1 \right) \right]. \quad (58)$$

En consecuencia, el sistema está formado por celdas que contienen sólo cuatro átomos diferentes. Nótese como, para λ grande $\gamma_j \rightarrow 0$ por lo que el sistema efectivo se reduce a dimeros con parámetro de salto entre los dimeros γ_0 y $\gamma_0 d$, confirmando, de esta manera, la discusión sobre la Fig. 21. Por otro lado, los bordes de banda del sistema efectivo para este valor particular de σ están dados por,

$$E(k_x) = \pm \gamma_0 \sqrt{1 + [\gamma_a(\lambda)]^2 \pm 2\gamma_a(\lambda) |\cos(k_x/2)|}. \quad (59)$$

De la ecuación anterior puede demostrarse que el tamaño de la brecha energética está dado por la siguiente expresión

$$\Delta_{\text{NGA}} = 2|\gamma_a(\lambda) - \gamma_0|. \quad (60)$$

Para posibles aplicaciones resulta útil encontrar el valor de λ a partir del cual la brecha energética es distinta de cero, es fácil demostrar, que esto ocurre para $\lambda > 0$. Por lo tanto, hemos encontrado que para abrir una brecha energética en el espectro del grafeno basta con inducirle una corrugación periódica en el espacio que sea conmensurable con el tamaño de la nanocinta a lo largo de la dirección y .

5.2. Caso inconmensurable

En esta sección se discutirá el caso en el que la frecuencia de la corrugación es inconmensurable con el período de la celda unitaria, para este fin, en la Fig. 22 se muestran la estructura de bandas y la densidad de estados para dos valores de σ que son inconmensurables con el período de la celda unitaria. Aún para este caso el modelo de dimeros continúa siendo válido y útil. Cuando $\gamma_j^{\text{NGA}} \rightarrow 0$ el sistema efectivo está formado por dimeros con integrales de transferencia entre ellos dadas por γ_0 y $\gamma_0 d$, ambos con energías propias $E = \pm\gamma_0$, las cuales están altamente degeneradas debido al factor $d(k_x)$, sin embargo, cuando el potencial efectivo se vuelve cuasi periódico, se rompe la degeneración y el espectro se desdobra, como puede verse en la Fig. 22. Sin embargo, aquellos dimeros que tienen integral de salto dada por γ_0 no son afectados dando lugar a las bandas parcialmente planas a energías $\pm\gamma_0$, como puede observarse en las densidades de estado mostradas en la Fig. 22 a) y b), en donde dos grandes picos aparecen a energías $\pm\gamma_0$.

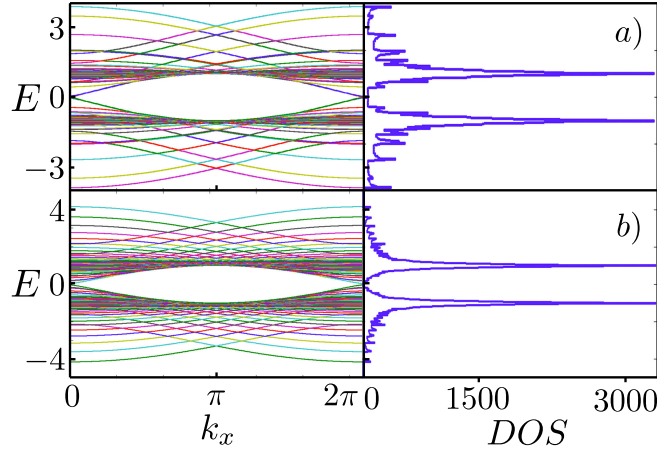


Figura 22: Estructura de bandas y densidad de estados para una NGA usando a) $\sigma = 4\sqrt{5/3}$ y b) $0,4\sqrt{7/3}$ para $\alpha = 0,4$ bajo las mismas condiciones que la Fig. 21. Nótese como la densidad de estados para ambos casos presenta muchos picos y dos bandas planas a energía $E = \pm t_0$.

5.3. Conclusiones

Encontramos que en el caso de una nanocinta de grafeno corrugada con terminación armchair es posible inducir una brecha energética en la estructura de bandas de dicha nanocinta. De hecho, para abrir dicha brecha energética basta con corrugar la nanocinta, sin embargo la corrugación debe ir a lo largo de la dirección zigzag (es decir, tiene que ser uniaxial) y ser periódica en el espacio, de forma que sea commensurable con el tamaño de la nanocinta.

6. Nanocintas de grafeno con terminación zigzag

Ahora se estudiará una nanocinta de grafeno con terminación zigzag, en este caso, el parámetro de salto está dado por

$$\gamma_j = \gamma_0 \left[1 + \alpha \left(1 - \hat{N}_j \cdot \hat{N}_{j+1} \right) \right] \times \exp \left\{ -\beta \left[\sqrt{1 + 4\lambda^2 \sin^2(\xi_j \pi \sigma / 2)} \sin^2 [\pi \sigma (3j/2 + 1) + \phi] - 1 \right] \right\}, \quad (61)$$

donde $\xi_j = [3 + (-1)^j]/4$.

En la figura 23 se presenta el espectro de energía obtenido por medio de la diagonalización numérica de la representación matricial del Hamiltoniano (27) y usando los parámetros de salto dados por la Ec. (61) para cada valor de k_x y σ para $\lambda = 0,8$, $\phi = 0$ e imponiendo condiciones de frontera cíclicas. En el panel a) de la Fig. 23 se usó $\alpha = 0$, mientras que en el panel b) se

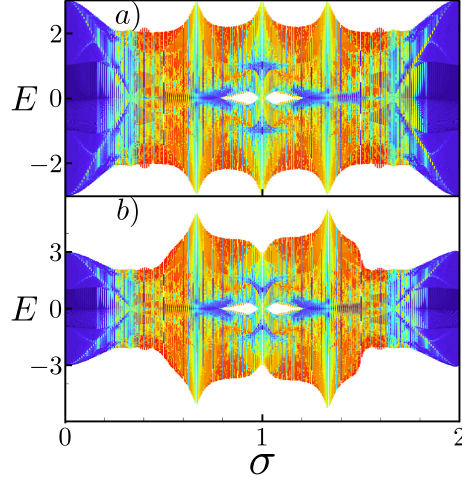


Figura 23: Espectro de energía como función de σ para una NGZ para $\lambda = 0,8$, a) $\alpha = 0$ y b) $\alpha = 0,4$ obtenido resolviendo la ecuación de Schrödinger para un sistema con $N = 80$ sitios por celda unitaria, usando 250 puntos para barrer k_x e imponiendo condiciones de frontera periódicas. Los colores representa el logaritmo de la razón de participación normalizada (NPR). Nótese como las brechas energéticas son de menor tamaño comparadas con el caso armchair y las funciones de onda muestran un patrón más localizado.

usó $\alpha = 0,4$. Al igual que antes los colores en la figura representan el logaritmo de la razón de participación normalizada, ver la ecuación (26).

Para la elaboración de las gráficas se usaron dos valores diferentes de α , a saber, a) $\alpha = 0$ y b) $\alpha = 0,4$. Como puede verse en la Fig. 23 (los diferentes colores en esta figura representan el logaritmos de la NPR) el espectro es muy similar al de una NGZ bajo deformación uniaxial en el plano, por lo que se procederá a estudiar únicamente el efecto de α en el espectro de la energía. Nótese como la estructura de dicho espectro es la misma para $\alpha = 0$ y $\alpha = 0,4$, salvo que en el último caso el espectro se ha ensanchado, de manera similar a como ocurre en el caso armchair. Esto es especialmente notorio cuando $\sigma = 2/3, 4/3$ (ver Fig. 23). Para estos valores, los parámetros de salto pueden escribirse como,

$$\gamma_j = \gamma_{\text{eff}}(\lambda) = \gamma_a(3\lambda/4) \left[1 + \alpha \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + 4\pi^2\lambda^2/3}} \right) \right] \quad (62)$$

donde $\gamma(\lambda)$ está definido en la ecuación (58). Si se sustituyen todos los parámetros obtenemos $\gamma_{\text{eff}}(0,8) = 0,19\gamma_0$ para $\alpha = 0,4$ y $\gamma_{\text{eff}}(0,8) = 0,15\gamma_0$ para $\alpha = 0$, por lo tanto estos valores son muy parecidos a pesar de que fueron calculados para diferentes valores de α . Es estos casos, el espectro es el mismo que el espectro de una NGZ sin deformar con un parámetro de salto efectivo dado por $\gamma_{\text{eff}}(0,8)$. Por otro lado, para σ 's alrededor de $2/3$ y $4/3$ pero no iguales a estos valores, el efecto de α se vuelve importante y el espectro se ensancha de manera considerable como puede

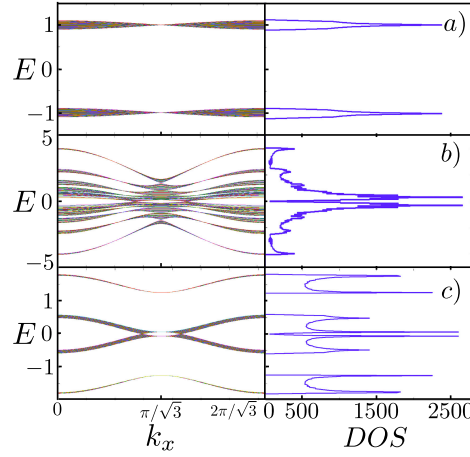


Figura 24: Estructura de bandas y densidad de estados de una NGZ para $\phi = 0$, $\lambda = 0,8$, a) $\sigma = 1$, b) $\sigma = (\sqrt{5} - 1)/2$ y c) $\sigma = 1/2$. Para la elaboración de las gráficas se usaron las mismas condiciones que en la Fig. 23. Nótese la gran brecha energética presente en el caso a), mientras que en b) la densidad de estados tiene muchos picos debido a la naturaleza irracional de σ . Finalmente, en el caso c) la densidad de estados es muy similar a la de densidad de estados cadenas débilmente acopladas.

ser visto en la Fig. 23. Esto se debe a que, al igual que en el caso armchair, α actúa como un potencial perturbativo que desdobra la estructura de bandas. Por otro lado, la Fig. 24 donde se presenta la estructura de bandas y la densidad de estados para a) $\sigma = 1$, b) $\sigma = (\sqrt{5} - 1)/2$ y c) $\sigma = 1/2$ para $\phi = 0$, $\lambda = 0,8$ y $N = 80$, además de imponer condiciones de frontera cíclicas. En la Fig. 24 se confirma que el efecto de α es mayor en las cercanías de $\sigma = 2/3$ y $\sigma = 4/3$, pues la estructura de bandas mostrada en el panel b) es mucho más ancha que las demás mostradas en la Fig. 24.

Ahora se discutirá la transición observada en la Fig. 24 conforme σ va de cero a uno. Esta discusión se realizará por medio de resultados analíticos para valores racionales de σ . El caso de σ irracional ya ha sido explicado antes y no será discutido aquí, para mayores detalles ver el capítulo 5.

6.1. Caso $\sigma = 1/2$

Para $\sigma = 1/4$ la celda unitaria tiene únicamente cuatro átomos diferentes, con parámetros de salto dados por,

$$\begin{aligned}\gamma_1^{\text{NGZ}} &= \gamma_1 = \gamma_a(\lambda/2) \left[1 + \alpha \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \pi^2 \lambda^2}} \right) \right] \\ \gamma_2^{\text{NGZ}} &= \gamma_2 = \gamma_0 + \gamma_0 \alpha \left(1 + \frac{1 - \pi^2 \lambda^2}{1 + \pi^2 \lambda^2} \right) \\ \gamma_3^{\text{NGZ}} &= \gamma_1 \\ \gamma_4^{\text{NGZ}} &= \gamma_a(\lambda),\end{aligned}\tag{63}$$

donde $\gamma_a(\lambda)$ está definido en la ecuación (58). Las energías para este caso, calculadas exactamente, son

$$E(k_x) = \pm \frac{1}{2} \left\{ \pm [\gamma_a(\lambda) + \gamma_2] \pm \sqrt{8\gamma_1^2 + [\gamma_a(\lambda) - \gamma_2]^2 + 8\gamma_1^2 \cos(\sqrt{3}k_x)} \right\}.\tag{64}$$

6.2. Caso $\sigma = 1$

Finalmente, el caso $\sigma = 1$ es mostrado en la Fig. 24 c). Nótese que la estructura de bandas así como la densidad de estados son las mismas que en el caso armchair mostrado en la Fig. 21 c). Para explicar esto obsérvese que cuando $\sigma = 1$, γ_j toma dos valores diferentes dependiendo de la paridad de la etiqueta j . Para j impar $\gamma_j = \gamma_0$, mientras que para j par $\gamma_j = \gamma(0,8) = 0,05\gamma_0$. De tal suerte que, nuevamente, el sistema esta formado por dímeros con integrales de salto intra dímeros dadas por $0,05\gamma_0 c(k_x)$ y γ_0 . Debido a que $0,05\gamma_0 \ll \gamma_0$ el sistema puede verse como dímeros débilmente acoplados vía $0,05\gamma_0 c(k_x)$. En consecuencia el tamaño de la brecha energética debe ser $2|2\gamma_a(0,8) - \gamma_0|$, según lo obtenido en el caso armchair. Esto conjetura será confirmada mediante cálculos analíticos.

Primero nótese que el parámetro de salto, para $\sigma = 1$, está dado por,

$$\gamma_j = \begin{cases} 1, & \text{if } j \text{ is even} \\ \gamma_a(\lambda) = \exp\{-\beta[\sqrt{1 + 4\lambda^2} - 1]\}, & \text{if } j \text{ is odd.} \end{cases}\tag{65}$$

Por lo tanto, el sistema efectivo tiene cuatro átomos diferentes por celda unitaria. Las energías de los bordes de banda de este sistema están dadas por,

$$E(k_x) = \pm \gamma_0 \pm 2\gamma_a(\lambda) \cos(\sqrt{3}k_x/2).\tag{66}$$

El tamaño de la brecha energética obtenido de la ecuación anterior resulta ser,

$$\Delta_{\text{NGZ}} = 2|2\gamma_a(0,8) - \gamma_0|.\tag{67}$$

Como se había conjeturado antes de realizar ningún cálculo. Al igual que antes, resulta útil calcular el valor mínimo de λ necesario para abrir una brecha energética en la estructura de bandas de la nanocinta considerada. Para este caso la brecha energética existe para valores de $\lambda > \lambda_c$, donde,

$$\lambda_c = \frac{1}{2} \sqrt{\left(1 + \frac{1}{\beta} \ln 2\right) - 1} \approx 0,34. \quad (68)$$

El valor mínimo requerido para generar una brecha energética excede la respuesta elástica del grafeno por lo que su aplicación práctica es difícil.

Con la información anterior podemos decir que la transición mostrada en la Fig. 24, es la transición entre una cadena lineal con dos átomos distintos (autonegías distintas dadas por $\gamma_a(\lambda)$ y t_2) con parámetro de salto γ_1 a una cadena lineal con átomos de un sólo tipo (autoenergía dada por t_0) con parámetro de salto $\gamma_a(\lambda)$.

6.3. Conclusiones

Se encontró que para el caso de nanocintas de grafeno corrugada con terminación zigzag no es posible abrir una brecha energética en la estructura de bandas, usando una amplitud de la corrugación que se encuentre dentro de la respuesta elástica del grafeno.

Parte III

Grafeno deformado: Caso dependiente del tiempo

Nanocintas de grafeno con terminación zigzag

Al analizar el caso de grafeno deformado (deformaciones estáticas, es decir, no dependientes del tiempo) hemos encontrado una serie de características muy interesantes, de las cuales quizás la más importante de ellas sea el hecho de que es posible abrir una brecha energética al nivel de Fermi tanto para nanocintas de grafeno con terminación armchair como para nanocintas con terminación zigzag. Claro está que hay dificultades experimentales para alcanzar las condiciones que hemos utilizado para lograr abrir dichas brechas energéticas, aunque, en principio es posible alcanzarlas experimentalmente utilizando redes artificiales o redes ópticas [48, 49, 50, 51, 52, 53]. Empero, no hemos mencionado ni explorado las propiedades topológicas del grafeno. En realidad el grafeno posee propiedades topológicas muy interesantes para el caso independiente del tiempo [15, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71] como para el caso dependiente del tiempo [72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 21]. Por ejemplo, para el caso estático, se ha probado que los conos de Dirac tienen una fase de Berry distinta de cero [80], lo cual implica que los conos de Dirac son robustos ante perturbaciones pequeñas y ante el desorden [81]. Además, debido a que los conos de Dirac siempre vienen en pares, cada uno de los miembros del par tiene una fase de Berry opuesta a la de su compañero [80]. Por esta razón, como una consecuencia de la correspondencia bulto-borde emerge un estado de borde (que en el caso de nanocintas finitas de grafeno con terminación zigzag son bandas planas [82]) que une dos conos de Dirac distintos [82] (es decir, dos conos de Dirac con fases de Berry opuestas entre sí). Estos estados de borde son bandas planas¹² para sistemas bidimensionales que no tienen brecha energética y, a decir verdad, tienen su origen en las propiedades topológicas de la ecuación de Dirac. Debido a que los estados que se encuentran en el cono son topológicos (es decir, tienen fase de Berry distinta de cero), esos estados no pueden ser transformados en estados topológicamente triviales (por estados triviales entendemos aquellos

¹²El origen de las bandas planas viene del espectro energético del sistema, pues dicho espectro puede tener puntos o líneas en los cuales los bordes de banda se tocan a energía cero. Esto fue observado por primera vez por Volovik [83, 82, 84]. En el caso del grafeno los bordes de banda se tocan en puntos, los conocidos puntos de Dirac. Sin embargo, hay una clase de materiales, los conocidos semimetales nodales, en los cuales los bordes de banda se tocan a energía a lo largo de líneas cerradas o abiertas en el espacio recíproco [85].

estados que tienen fase de Berry cero), por lo tanto, si el sistema es considerado a ser finito, una banda plana uniendo dichos conos de Dirac emerge; los estados de dicha banda plana están muy localizados cerca de los bordes de la nanocinta en consideración. La emergencia de bandas planas no se observa únicamente en sistemas bidimensionales, de hecho la versión tridimensional de los semimetales de Dirac (es decir, aquellos metales bidimensionales que tienen conos de Dirac), los semimetales de Weyl, también dan origen a bandas planas, conocidas como arcos de Fermi, que unen dos puntos de Weyl diferentes, cada uno de ellos con carga topológica opuesta a la de su compañero [85]. Ambos puntos, los de Dirac y los de Weyl, son muy robustos debido a que están protegidos topológicamente¹³.

Por otro lado, si aplicamos una perturbación dependiente del tiempo al grafeno, nuevas propiedades topológicas emergen. Por ejemplo, cuando se aplica un campo eléctrico AC dependiente del tiempo al grafeno, es posible obtener una transición de fase que va de una fase semimetálica que es topológica a una fase aislante que es topológicamente trivial [72]. Uno también puede abrir brechas energéticas en la estructura de bandas del grafeno de manera controlada si se le irradia con un láser, la manera de controlar la apertura de la brecha energética es mediante la intensidad del láser [87, 88]. Similarmente (esto es por medio de la aplicación de luz láser), uno puede observar estados de borde chirales topológicos de Floquet que aparecen cuando el grafeno tiene una brecha energética distinta de cero, de hecho tales estados pueden ser controlados muy precisamente por medio del cambio de la intensidad de la luz del láser [75]. Las propiedades topológicas anteriores necesitan una brecha energética para emerger y por eso son parecidas a las propiedades de los aislantes topológicos. Sin embargo, uno puede tener propiedades topológicas no triviales en sistemas en los que no hay brecha energética [82, 84]. Uno puede mencionar, por ejemplo, el modelo de Harper pulsado [89] y el modelo de Su-Schieffer-Heeger pulsado [90]. En el modelo de Harper pulsado uno puede crear tantos puntos en los que los bordes de banda se tocan siguiendo una dispersión lineal (estos puntos son una especie de conos de Dirac que pueden aparecer a energías distintas de cero) como se quiera, esto se logra al cambiar el período del pulso. Los puntos en donde los bordes de banda se tocan dan lugar a la aparición de bandas planas si dichos puntos emergen en pares para los que cada uno de los puntos tiene una carga topológica opuesta a la de su compañero [89]. Como veremos más adelante uno puede tener el mismo efecto que se observa en el modelo de Harper pulsado si se aplica una deformación mecánica de manera pulsada. Por las razones anteriores, en lo que resta de este documento nos dedicaremos a analizar

¹³La robustez de los puntos de Weyl (o puntos de Dirac si el sistema es bidimensional) se debe a que en la vecindad de los puntos de Weyl el Hamiltoniano del sistema puede ser descrito por un Hamiltoniano de Weyl. Por lo tanto, las funciones de onda describen fermiones de Weyl con chiralidad opuesta [86], en otras palabras, los puntos de Weyl siempre aparecen en pares, cada par teniendo carga topológica cero (chiralidad cero). Debido a que los puntos de Weyl aparecen al nivel de Fermi, la única manera de abrir una brecha energética es por medio de la aniquilación de dos puntos de Weyl con chiralidad opuesta (similarmente, en grafeno es necesario aniquilar dos conos de Dirac con fase de Berry opuesta para lograr abrir una brecha energética, esto puede ser logrado mediante tensión mecánica como se mostró en la Parte II).

el efecto que tiene en las propiedades electrónicas de nanocintas de grafeno el aplicarles un campo de deformación de manera pulsada y periódica en el tiempo. Haremos eso dentro de la aproximación de amarre fuerte y dentro del formalismo de la teoría de Floquet. Más adelante mostraremos que al aplicar la deformación pulsada a las nanocintas somos capaces de obtener bandas planas que están topológicamente protegidas. Antes de terminar, a modo de justificación, diremos que la importancia de las bandas planas radica en su posible utilidad en el campo de la computación cuántica topológica [91]. Su aplicación a esta tecnología es posible porque tanto los puntos de Dirac como los puntos de Weyl siempre vienen en pares y pueden dar lugar a excitaciones de baja energía que se comportan de manera efectiva como fermiones de Majorana¹⁴ [106, 107, 64, 108], lo cual le da, a estas excitaciones, una gran resistencia a perturbaciones débiles y disminuye los efectos de decoherencia [91].

El estudio de los efectos de la aplicación de un campo de deformación pulsado a nanocintas de grafeno con terminación zigzag se hará en los siguientes dos capítulos. Se comenzará con el caso en el que la deformación se aplica dentro del plano de la nanocinta (capítulo 7). Después, en el capítulo 8, se estudiará el caso en el que la deformación induce corrugaciones en la nanocinta.

7. Deformación dentro del plano de la nanocinta

Comencemos, como siempre, con una nanocinta de grafeno con terminación zigzag como la que se muestra en la Fig. 25 a). Ahora suponga que a dicha nanocinta se le aplica una deformación uniaxial periódica como la siguiente,

$$u(y) = \frac{2\lambda}{9} \cos \left[\frac{8\pi}{3} \sigma(y - 1/2) + \phi \right],$$

que es la misma deformación que se usó en el capítulo 3. Una vez más, los parámetros de dicha deformación son la amplitud (λ), la frecuencia (σ) y la fase (ϕ). Al igual que en el capítulo 3, las propiedades electrónicas de dicha nanocinta estarán bien descritas, a bajas energías, por el siguiente Hamiltoniano de amarre fuerte,

$$H(k_x) = \sum_{j=1}^{N-1} \left[\gamma_{2j} a_{2j+1}^\dagger b_{2j} + c(k_x) \gamma_{2j-1} a_{2j-1}^\dagger b_{2j} \right] + \text{h.c.}$$

donde $c(k_x) = 2 \cos(\sqrt{3}k_x/2)$, el operador a_j (b_j) aniquila un electrón en el sitio j de la celda unitaria mostrada en la Fig. 25 a) (en dicha figura la celda unitaria se encuentra dentro de

¹⁴De hecho mucho sistemas teóricas de materia condensada que pueden dar lugar a excitaciones tipo fermión de Majorana han sido propuestos, entre ellos, los más prometedores parecen ser los sistemas modulados periódicamente en el tiempo, los cuales son estudiados usando el formalismo de Floquet [92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100, 101, 102, 103, 104]. Es un hecho interesante el que este tipo de sistemas puede dar lugar a bandas planas no sólo

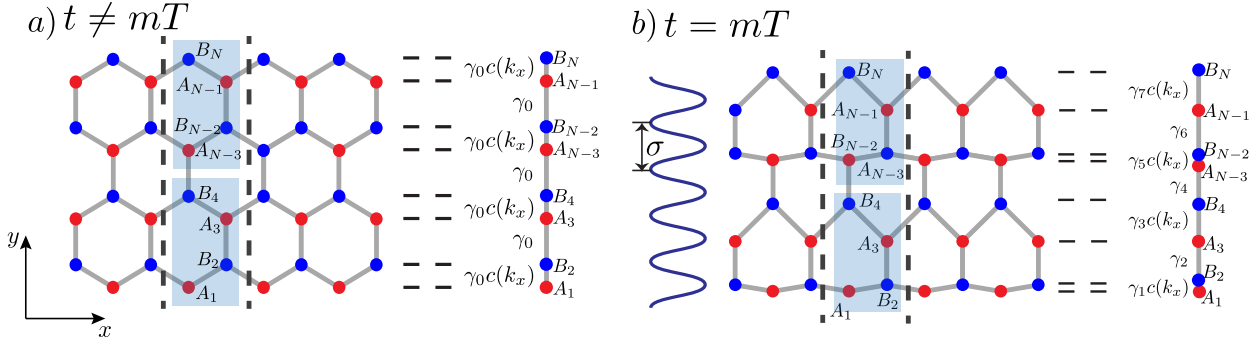


Figura 25: Diagrama esquemático de la modulación temporal en el caso de pulsos ultra cortos para una nanocinta de grafeno con terminación zigzag. El campo de deformación es encendido (b) para tiempos tales que $t = mT$, donde m es un número entero y T es el período de la modulación temporal. Por otro lado, para $t \neq mT$ el campo de deformación es apagado como se muestra en el panel a). Debido a que el campo de deformación únicamente depende de la componente y de la posición de los átomos de carbono en la nanocinta, la nanocinta deformada puede ser mapeada a un sistema efectivo unidimensional, el cual es representado por las cadenas lineales en la figura. Las posiciones de los átomos de carbono están indicadas por medio de círculos sólidos.

las líneas punteadas negras) y N es el número de átomos por celda unitaria. Por otro lado, si consideramos el límite de amplitudes pequeñas del campo de deformación, los parámetros de salto toman la siguiente forma,

$$\gamma_j = \gamma_0 + \lambda \gamma_0 \xi(j+1) \sin[\pi \sigma \xi(j)] \sin(2\pi \sigma j + \phi), \quad (69)$$

donde $\xi(j) = 1 + (-1)^j/3$, ver capítulo 3 para mayores detalles.

Después de haber recordado la forma explícita del Hamiltoniano usado para describir las propiedades electrónicas de una nanocinta deformada de grafeno con terminación zigzag, toca el turno de introducir la dependencia temporal que será considerada. La dependencia temporal será introducida vía los parámetros de salto, en particular consideraremos el siguiente tipo de modulación,

$$\gamma_j(t) = \begin{cases} \gamma_0 & \text{if } t < \text{mod}(t, T) < t_1 \\ \gamma_j & \text{if } t_1 < \text{mod}(t, T) < T \end{cases} \quad (70)$$

donde T es el período de la modulación y t_1 es un tiempo dado tal que $0 \leq t_1 < T$. Esto nos lleva al siguiente Hamiltoniano dependiente del tiempo,

$$H(k_x, t) = \sum_{j=1}^{N-1} \left[\gamma_{2j}(t) a_{2j+1}^\dagger b_{2j} + c(k_x) \gamma_{2j-1}(t) a_{2j-1}^\dagger b_{2j} \right] + \text{h.c.} \quad (71)$$

a energía cero sino también a energías en el borde de la zona de Floquet (Para ser más precisos cuasi energías. Se les llama de esta manera porque sólo están bien definidas modulo 2π). Lo más importante es que estas bandas planas están formadas de electrones que se comportan de manera efectiva como fermiones de Majorana [100, 105].

El Hamiltoniano anterior describe a una nanocinta para la cual el campo de deformación es encendido siempre que el tiempo se encuentre dentro del intervalo (mt_1, mT) donde m es un número entero positivo distinto de cero. Mientras que la nanocinta no experimenta ningún campo de deformación si el tiempo se encuentra en el intervalo dado por $(0, mt_1)$. Por simplicidad estudiaremos el límite en el que $t_1 \rightarrow T$, es decir, estudiaremos el caso de pulsos ultra cortos¹⁵. Hacemos esto porque el límite nos permite realizar cálculos analíticos, pues, siempre que el producto de la amplitud del pulso (en nuestro caso, la amplitud del campo de deformación) por la duración del pulso $(T - t_1)$ sea constante, la modulación temporal puede ser descrita usando funciones delta de Dirac si se considera el límite $t_1 \rightarrow T$. Debido a que este caso límite presenta serias limitaciones experimentales, más adelante, discutiremos la posibilidad de la realización experimental de nuestro modelo y, además, se estudiará el caso en el que la modulación temporal es de tipo cosenoidal porque dicho tipo de modulación es más fácil de obtener de manera experimental.

Se sigue que, si consideramos el límite $t_1 \rightarrow T$ [con $\lambda(T - t_1)$ constante], los parámetros de salto, Ec. (70) pueden escribirse como,

$$\gamma_j(t) = \gamma_0 + \sum_m \delta(t/T - m) \gamma_0 \lambda \xi(j+1) \sin[\pi \sigma \xi(j)] \sin(2\pi \sigma j + \phi), \quad (72)$$

donde m es un número entero distinto de cero. En la Fig. 25 se muestra una representación esquemática de dicho modulación. En dicha figura puede verse que el campo de deformación se enciende para tiempos $t = mT$, mientras que es apagada siempre que $t \neq mT$. La dependencia temporal de nuestro modelo será estudiada por medio del operador de evolución temporal de un período que se define como,

$$U(T) |\psi_k(t)\rangle = |\psi_k(t+T)\rangle, \quad (73)$$

donde $|\psi_k(t)\rangle$ es el vector de onda dependiente del tiempo de nuestro sistema para una k dada. La ventaja de considerar el límite de pulsos ultra cortos es que el operador de evolución temporal de un período, Ec. (73), puede escribirse de una manera muy sencilla, para nuestro caso toma la siguiente forma,

$$U(k_x, \tau) = \mathcal{T} \exp \left[-i \int_0^T H(k_x, t) dt / \hbar \right] = \exp[-i\tau H_1(k_x)] \exp[-i\tau H_0(k_x)], \quad (74)$$

en donde \mathcal{T} denota el operador de ordenamiento temporal, $\tau = T/\hbar$ y

$$\begin{aligned} H_0(k_x) &= \gamma_0 \sum_{j=1}^{N-1} \left[a_{2j+1}^\dagger b_{2j} + c(k_x) a_{2j-1}^\dagger b_{2j} \right] + \text{h.c.}, \\ H_1(k_x) &= \sum_{j=1}^{N-1} \left[\delta \gamma_{2j} a_{2j+1}^\dagger b_{2j} + c(k_x) \delta \gamma_{2j-1} a_{2j-1}^\dagger b_{2j} \right] + \text{h.c.} \end{aligned} \quad (75)$$

¹⁵Es importante mencionar que muchos trabajos teóricos usando este tipo de modulación temporal han sido realizados, ver, por ejemplo las referencias [109, 110, 101, 111, 112, 113, 89].

donde hemos usado que $\delta\gamma_j = \gamma_j - \gamma_0$. En general los Hamiltonianos $H_0(k_x)$ y $H_1(k_x)$ no conmutan. Sin embargo, a pesar de eso, es posible estudiar el espectro de eigen valores del operador de evolución temporal de un período, Ec. (74), por medio de un Hamiltoniano efectivo $H_{\text{eff}}(k_x, \tau)$ definido como,

$$U(k_x, \tau) = \exp[-i\tau H_{\text{eff}}(k_x, \tau)], \quad (76)$$

se sigue que los eigenvalores del operador $U(k_x, \tau)$ están dados por $\exp[-i\tau\omega(k_x, \tau)]$, donde $\tau\omega(k_x, \tau)$ son los eigenvalores del Hamiltoniano efectivo $\tau H_{\text{eff}}(k_x, \tau)$. A los eigenvalores $\tau\omega(k_x, \tau)$ se les conoce como las cuasi energías del sistema porque únicamente están definidas modulo 2π debido a la periodicidad del espacio de Floquet. Una vez que la dependencia temporal ha sido introducida al modelo contamos con cuatro parámetros libres, uno debido a la modulación temporal (el período de la modulación τ) y tres debidos al campo de deformación (λ , σ y ϕ).

Aunque uno puede estudiar el sistema para un amplio rango de parámetros hemos decidido concentrarnos en el caso más sencillo, es decir, el caso para el cual los parámetros de salto Ec. (69) únicamente toman dos valores, eso se logra si se considera que $\sigma = 1/2$ y $\phi = 4\pi\sigma/3$. Para ese caso tenemos que los parámetros de salto pueden escribirse como,

$$\begin{aligned} \gamma_{2j-1} - \gamma_0 &= -\lambda \\ \gamma_{2j} - \gamma_0 &= \lambda/2. \end{aligned} \quad (77)$$

Este caso es interesante pues, para los valores de σ y ϕ elegidos, el sistema se encuentra en una línea crítica que separa dos fases topológicamente distintas vía el parámetro λ en el caso independiente del tiempo. En dicho caso para $\lambda < \lambda_c = 0,4$ el sistema se encuentra en una fase semi metálica topológicamente trivial (esta fase no tiene brecha energética y hay puntos de Dirac), aunque puede dar lugar a estados de borde, que son bandas planas [82]. Para $\lambda > \lambda_c$ el sistema se encuentra en una fase aislante de Zak (ya no hay conos de Dirac y el sistema tiene una brecha energética pero aún puede haber estados de borde [114, 54]). Como ya se vio en el capítulo 4, en el punto crítico, λ_c , a bajas energías, los electrones se comportan como fermiones de Dirac en una dirección mientras que en la otra se comportan como fermiones de Schrödinger con masa. Sin embargo, debido a que hemos considerado el límite de amplitudes de deformación pequeñas comparadas con el parámetro de red del grafeno, siempre estaremos en regiones para las que $\lambda \ll \lambda_c$. La razón principal para elegir este límite tiene que ver con razones experimentales, pues es mucho más fácil producir deformaciones mecánicas pequeñas e nanocintas de grafeno de manera controlada.

Una vez que se ha descrito el modelo a ser usado, el siguiente paso es analizar el espectro de cuasi energías del operador de evolución temporal de un período, Ec. (74), como función de τ , manteniendo los parámetros de la deformación constantes y usando una k_x fija. Este tipo de espectros es interesante porque nos da información acerca de los valores mínimos necesarios para que estados de borde emerjan en el espectro de energías.

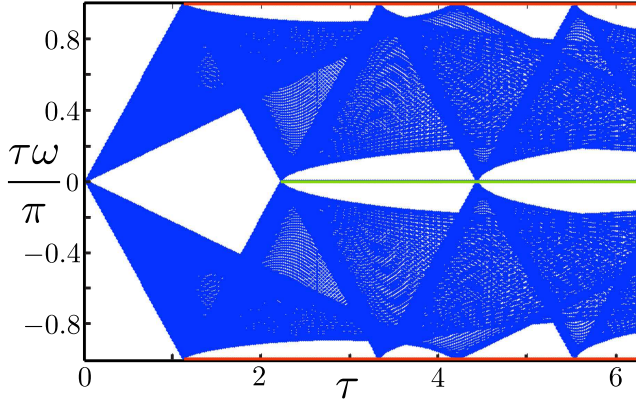


Figura 26: Espectro de cuasi energías obtenido numéricamente de la ecuación (74). La gráfica fue obtenida para $k_x = 0$, $\lambda = 0,1$, $\sigma = 1/2$ y $\phi = 4\pi\sigma/3$, $N = 240$ e imponiendo condiciones de frontera fijas. Observe como los bordes de banda se tocan a sí mismos para ciertos valores de τ a cuasi energías $\tau\omega(0, k_y) = 0, \pm\pi$. En dichos puntos emergen bandas planas (estados de borde sin dispersión), los cuales se indican en la figura con líneas rojas sólidas para $\tau\omega = \pm\pi$ y con líneas verdes sólidas para $\tau\omega = 0$.

7.1. Espectro de cuasi energías: Resultados numéricos

Empezaremos por construir la representación matricial del operador $U(k_x, \tau)$, Ec. (74), para luego obtener sus eigenvalores de manera numérica. En todos los casos estudiados aquí consideramos que $\tau\omega(\tau, k_x)$ fue obtenida usando los siguientes valores de los parámetros del campo de deformación, a saber, $\sigma = 1/2$, $\phi = 4\pi\sigma/3$, $\lambda = 0,1$, $N = 240$ sitios por celda unitaria e imponiendo condiciones de frontera fijas. El espectro resultante es mostrado en la Fig. 26 para un corte en $k_x = 0$. Para valores pequeños de τ el espectro tiene una brecha energética alrededor del cero de la cuasi energía cuyo tamaño (el de la brecha energética) crece linealmente con τ . De la misma manera, los bordes de banda exteriores también crecen de manera lineal conforme τ crece. Después para un valor crítico de τ (el cual denotaremos por τ_c), los bordes de banda exteriores alcanzan el límite de la primera zona de Brillouin del espacio de Floquet. Observe como a dichos puntos aparecen estados de borde a energías a cuasi energías $\pm\pi$ que, para el caso estudiado aquí, son bandas planas, las cuales están representadas por líneas rojas sólidas en la Fig. 26. Si seguimos incrementando el valor de τ , alcanzaremos el punto en el cual $\tau = 2\tau_c$, en donde las bordes de banda exteriores se vuelven a cruzar pero ahora a cuasi energía cero, dando lugar a bandas planas a esta cuasi energía (ver Fig. 26 en donde dichas bandas planas están representadas por líneas sólidas de color rojo). La naturaleza plana de estos estados de borde sugiere que ellas se originan debido a efectos de borde. De hecho, debido a que dichas bandas planas emergen en puntos en los que los bordes de banda se cruzan, las bandas planas tienen un origen similar al de los estados que aparecen en el modelo de Shockley [115, 116, 117, 98]. En dicho modelo las bandas planas siempre vienen en pares y pueden tener una naturaleza tipo fermión de Majorana. A decir verdad, se ha predicho que estos estados de borde que se comportan de manera efectiva como fermiones de Majorana aparecen en un superconductor unidimensional de onda s [96]. Sin embargo, en nuestro modelo que es bidimensional, uno espera que las bandas planas observadas en la Fig. 26 den lugar a bandas planas hechas de fermiones tipo fermiones de Majorana en la estructura de bandas, es decir, en el espectro de cuasi energías como función de k_x .

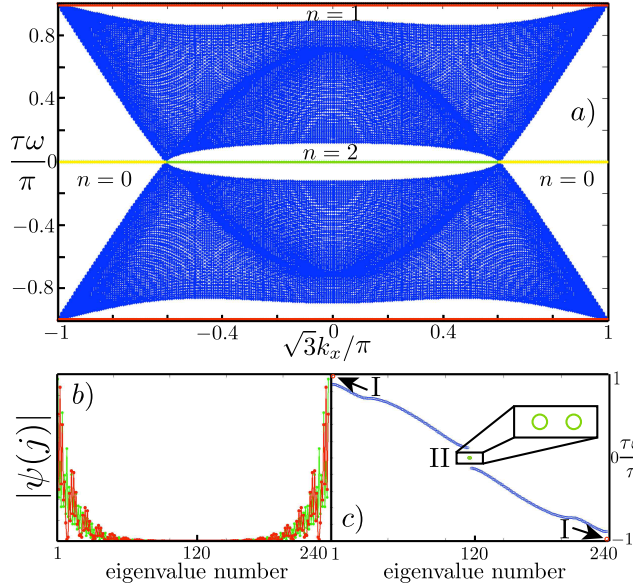


Figura 27: Panel superior. Estructura de bandas de las cuasi energías como una función de k_x para $\lambda = 0,1$, $\sigma = 1/2$, $\phi = 4\pi\sigma/3$ y $\tau = 3$. Observe la presencia de bandas planas a cuasi energías cero y $\pm\pi$. Nótese que para $\tau\omega(\mathbf{k}, \tau) = 0$ hay dos tipos de bandas planas, un tipo tiene un origen independiente del tiempo (líneas amarillas) y el otro tipo tiene un origen dependiente del tiempo (líneas verdes), para detalles sobre este punto vea el texto principal. La etiqueta n indica la región correspondiente en el diagrama de fase topológico y también indica el tipo de estados de borde. Para n impar tenemos bandas planas a cuasi energías $\pm\pi$ (líneas color rojo), mientras que n par indica estados de borde a cuasi energía cero (líneas color verde). El caso $n = 0$ corresponde a los estados de borde que son independientes del tiempo a cuasi energía cero (líneas color amarillo). En el panel b), presentamos la amplitud de dos funciones de onda para $\tau\omega = 0$ y $\tau\omega = \pi$ usando $k_x = 0$. Las amplitudes siguen el mismo código de color que se usó en el panel a). El panel c) se presenta el valor de las cuasi energías como función del número del eigen valor de la cuasi energía para $k_x = 0$.

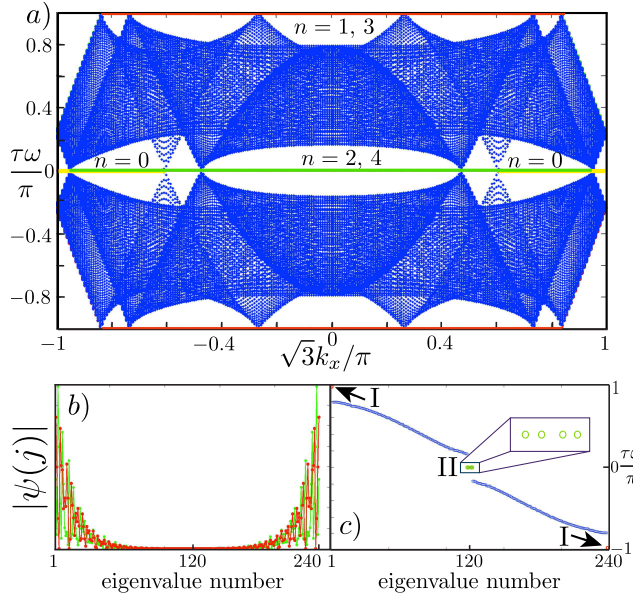


Figura 28: Panel superior. Estructura de bandas de las cuasi energías obtenido usando las mismas condiciones de la Fig. 27 pero usando $\tau = 5,28$. La etiqueta n indica la región correspondiente en el diagrama de fase topológico y también indica el tipo de estados de borde. Para n impar tenemos bandas planas a cuasi energías $\pm\pi$ (líneas color rojo), mientras que para n par tenemos bandas planas a cuasi energía cero (líneas color verde). El caso $n = 0$ corresponde a bandas planas con un origen independiente del tiempo a cuasi energía cero (líneas color amarillo). En el panel b) mostramos las amplitudes de dos funciones de onda para estados de borde en $k_x = 0$, además se ha usado el mismo código de color que en el panel a). En el panel c), presentamos el valor de la cuasi energía como función de su número de eigen valor.

Para confirmar la afirmación anterior, hemos graficado la estructura de bandas de las cuasi energías como una función de k_x para $\tau = 3$ (ver Fig. 27) y para $\tau = 5,28$ (ver Fig. 28) bajo las mismas condiciones en las que fue realizada la Fig. 26. En los paneles b) de las Figs. 27 y 28 mostramos la amplitud de las funciones de onda que exhiben una dispersión lineal. Claramente dichas funciones de onda están localizadas cerca de los bordes de la nanocinta, además, las funciones de onda siempre vienen en pares. Es importante notar que cada una de las bandas planas está separada de las bandas del bulto por una brecha energética secular, este hecho sugiere que las bandas planas podrían tener propiedades topológicas no triviales, también sugiere que las bandas planas pueden dar lugar a excitaciones de baja energía (alrededor de cuasi energía cero y $\pm\pi$) tipo fermiones de Majorana. Finalmente, observe que hay tres tipos de bandas planas, un tipo a cuasi energía $\pm\pi$ (que están representadas por I y por líneas rojas en las figuras) y otros dos tipos a cuasi energía cero (indicadas por II y por líneas verdes y rojas en las figuras). Las bandas planas de color amarillo, como será visto más adelante, son los bien conocidos estados de borde a energía cero que aparecen en nanocintas finitas de grafeno con terminación zigzag. En el caso estático estas bandas planas unen dos conos de Dirac con fase de Berry opuesta. Este tipo de bandas no tiene su origen en la modulación temporal, más bien, provienen de las propiedades estáticas de las nanocintas de grafeno. Nótese que, similarmente, al caso estático, las bandas planas que emergen a cuasi energía cero y $\pm\pi$ unen dos puntos en los cuáles los bordes de banda se tocan, lo que sugiere que el origen de dichas bandas planas es similar al origen de la bandas planas que emergen en nanocintas de grafeno con terminación zigzag. El análisis necesario para confirmar o rechazar el enunciado anterior será hecho en la siguiente sección.

7.2. Estudio analítico del espectro de cuasi energías

Una vez que los resultados numéricos para el caso $\sigma = 1/2$ y $\phi = 2\pi/3$ han sido presentados, es hora de explicarlos por medio de cálculos analíticos. Debido a que hemos elegido $\sigma = 1/3$ los parámetros de salto únicamente toman dos valores distintos [ver Ec. (77)], el sistema (la nanocinta de grafeno con terminación zigzag deformada) es periódica no sólo en la dirección x (como se supuso de entrada) sino también a lo largo de la dirección y . Podemos ir más lejos aún, dado que los parámetros de salto sólo toman dos valores distintos el sistema puede describirse utilizando matrices 2×2 . Esto se debe a que k_y es un buen número cuántico como consecuencia de la periodicidad a lo largo de la dirección y . Para encontrar el Hamiltoniano 2×2 que describe al sistema para estos valores particulares de la frecuencia y la fase de la deformación ($\sigma = 1/2$ y $\phi = 2\pi/3$) procedemos como de costumbre, esto es, aplicamos una transformada de Fourier a los Hamiltonianos $H_0(k_x)$ y $H_0(k_x)$ para, de esta manera, movernos al espacio recíproco. Las

transformadas de Fourier adecuadas para este fin son las siguientes,

$$\begin{aligned} a_j &= \frac{1}{\sqrt{N/2}} \sum_{k_y} e^{-i3k_y j/2} a_{k_y} \\ b_j &= \frac{1}{\sqrt{N/2}} \sum_{k_y} e^{-i3k_y j/2} b_{k_y}, \end{aligned} \quad (78)$$

como antes N es el número de átomos por celda unitaria. Si sustituimos la Ec. (78) en la Ec. 75, después de algunas manipulaciones algebraicas, uno encuentra lo siguiente,

$$\begin{aligned} H_0(\mathbf{k}) &= h_0(\mathbf{k}) \hat{\mathbf{h}}_0(\mathbf{k}) \cdot \sigma \\ H_1(\mathbf{k}) &= h_1(\mathbf{k}) \hat{\mathbf{h}}_1(\mathbf{k}) \cdot \sigma \end{aligned} \quad (79)$$

donde $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ son las matrices de Pauli, $\hat{\mathbf{h}}_0(\mathbf{k}) = \mathbf{h}_0(\mathbf{k})/|h_0(\mathbf{k})|$, $\hat{\mathbf{h}}_1(\mathbf{k}) = \mathbf{h}_1(\mathbf{k})/|h_1(\mathbf{k})|$. Note que $h_0(\mathbf{k})$ [$h_1(\mathbf{k})$] es la magnitud de $\mathbf{h}_0(\mathbf{k})$ [$\mathbf{h}_1(\mathbf{k})$]. Las componentes de los vectores $\mathbf{h}_0(\mathbf{k})$ y $\mathbf{h}_1(\mathbf{k})$ están dadas por las siguientes expresiones,

$$\begin{aligned} h_0^{(x)}(\mathbf{k}) &= 2 \cos(\sqrt{3}k_x/2) + \cos(3k_y/2) \\ h_0^{(y)}(\mathbf{k}) &= \sin(3k_y/2), \\ h_1^{(x)}(\mathbf{k}) &= 2\gamma_1 \cos(\sqrt{3}k_x/2) + \gamma_2 \cos(3k_y/2) \\ h_1^{(y)}(\mathbf{k}) &= \gamma_2 \sin(3k_y/2). \end{aligned} \quad (80)$$

Si usamos los Hamiltonianos definidos en la ecuación (79), el operador de evolución temporal de un período, Ec.(74), toma la siguiente forma,

$$U(\mathbf{k}, \tau) = \sum_{k_y} \mathcal{U}(\mathbf{k}, \tau) \otimes |k_y\rangle \langle k_y|. \quad (81)$$

Hemos usado que $\delta H(\mathbf{k}) = H_1(\mathbf{k}) - H_0(\mathbf{k})$, y que,

$$\mathcal{U}(\mathbf{k}, \tau) = \exp[-i\tau\delta H(\mathbf{k})] \exp[-i\tau H_0(\mathbf{k})]. \quad (82)$$

Antes de continuar es útil calcular el conmutador de los Hamiltonianos definidos en la Ec. (79). Usando las propiedades de las matrices de Pauli, es fácil demostrar que dicho conmutador es el siguiente,

$$[H_0(\mathbf{k}), H_1(\mathbf{k})] = -3ih_0(\mathbf{k})h_1(\mathbf{k}) [\hat{\mathbf{h}}_0(\mathbf{k}) \times \hat{\mathbf{h}}_1(\mathbf{k})]. \quad (83)$$

Por otro lado, debido a que los Hamiltonianos Ec. (79) son matrices 2×2 , uno puede obtener el Hamiltoniano efectivo del sistema definido como sigue,

$$\mathcal{U}(\mathbf{k}, \tau) = \exp[-i\tau H_{\text{eff}}(\mathbf{k})], \quad (84)$$

de manera analítica usando la regla de suma de SU(2), la cual está dada por la siguiente formula,

$$e^{ia(\hat{n}\cdot\sigma)}e^{ib(\hat{m}\cdot\sigma)} = e^{-ic(\hat{g}\cdot\sigma)} \quad (85)$$

donde

$$\cos c = \cos a \cos b - \hat{n} \cdot \hat{m} \sin a \sin b \quad (86)$$

con

$$\hat{g} = \frac{1}{\sin c}(\hat{n} \sin a \cos b + \hat{m} \sin b \cos a - \hat{n} \times \hat{m} \sin a \sin b). \quad (87)$$

Usando las ecuaciones (79), (80), (82), (85), (86) y (87), uno obtiene que el Hamiltoniano efectivo definido en la ecuación (84) está dado por,

$$H_{\text{eff}}(\mathbf{k}) = \tau\omega(\mathbf{k}, \tau) \hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \tau) \cdot \sigma, \quad (88)$$

las cuasi energías, $\tau\omega(\mathbf{k}, \tau)$, pueden ser obtenidas de la siguiente expresión,

$$\cos [\tau\omega(\mathbf{k}, \tau)] = \cos [\tau \delta h(\mathbf{k})] \cos [\tau h_0(\mathbf{k})] - \hat{\mathbf{h}}_0(\mathbf{k}) \cdot \delta \hat{\mathbf{h}}(\mathbf{k}) \sin [\tau \delta h(\mathbf{k})] \sin [\tau h_0(\mathbf{k})], \quad (89)$$

donde $\delta \mathbf{h}(\mathbf{k}) = \mathbf{h}_1(\mathbf{k}) - \mathbf{h}_0(\mathbf{k})$, y

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{h}}_0(\mathbf{k}) \cdot \delta \hat{\mathbf{h}}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{h_0(\mathbf{k}) \delta h(\mathbf{k})} \left[4(\gamma_1 - 1) \cos^2 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_x \right) + \gamma_2 - 1 \right] \\ &+ \frac{1}{h_0(\mathbf{k}) \delta h(\mathbf{k})} \left[2(\gamma_1 + \gamma_2 - 2) \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_x \right) \cos \left(\frac{3k_y}{2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (90)$$

El vector unitario $\hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \tau)$ está dado por,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \tau) &= \frac{-1}{\sin [\tau\omega(\mathbf{k})]} \left[\delta \mathbf{h}(\mathbf{k}) \sin [\tau \delta h(\mathbf{k})] \cos [\tau h_0(\mathbf{k})] \right] \\ &+ \frac{-1}{\sin [\tau\omega(\mathbf{k})]} \left[\hat{\mathbf{h}}_0(\mathbf{k}) \sin [\tau h_0(\mathbf{k})] \cos [\tau \delta h(\mathbf{k})] \right] \\ &+ \frac{-1}{\sin [\tau\omega(\mathbf{k})]} \left[\delta \mathbf{h}(\mathbf{k}) \times \hat{\mathbf{h}}_0(\mathbf{k}) \sin [\tau \delta h(\mathbf{k})] \sin [\tau h_0(\mathbf{k})] \right]. \end{aligned} \quad (91)$$

Usando la Ec. (89) somos capaces de reproducir las gráficas obtenidas por medio de cálculos numéricos. Por ejemplo, en la Fig. 29 se ha graficado la contraparte analítica de la Fig. 26, es decir, hemos graficado $\tau\omega(\mathbf{k} = 0\hat{i} + k_y\hat{j}, \tau)$. Observe como los resultados numéricos y analíticos coinciden de manera perfecta. La única diferencia tiene que ver con el hecho de que la Fig. 26 es una proyección de la versión tridimensional mostrada en la Fig. 29. Además, en la Fig. 29 no

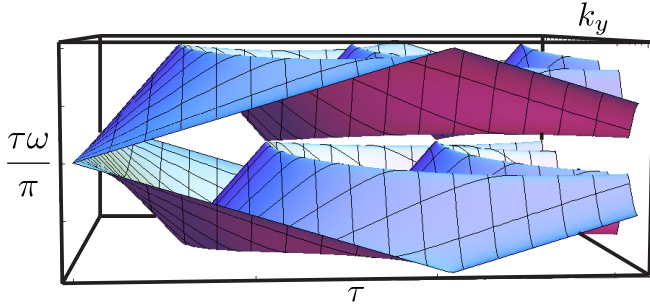


Figura 29: (Color online). Espectro de cuasi energías analítico obtenido de la Ec. (89). En el eje vertical graficamos $\tau\omega(\mathbf{k}, \tau)/\pi$ como una función de k_y y τ para $k_x = 0$, $\lambda = 0,1$, $\sigma = 1/2$ y $\phi = 2\pi/3$. Nótese que esta figura reproduce de manera excelente el espectro de cuasi energía obtenido por medio de cálculos numéricos mostrado en la Fig. 26. Sin embargo, las bandas planas que aparecen en la Fig. 26 no se ven en esta figura debido a que aquí no estamos tomando en cuenta los efectos de borde.

aparecen los estados de borde porque hemos usado condiciones de frontera cíclica para obtener las cuasi energías de manera analítica.

Al observar las Figs. 27 y 28 vemos que las bandas planas siempre emergen en puntos donde los bordes de banda se tocan en los puntos \mathbf{k}^* , los cuales están dados por la siguiente condición $\tau\omega(\mathbf{k}^*, \tau) = n\pi$. Por lo tanto, con el fin de obtener las propiedades topológicas de nuestro sistema, tenemos que encontrar la forma explícita de los puntos \mathbf{k}^* . A partir de ahora, llamaremos a los puntos \mathbf{k}^* *touching band points* (que en español sería puntos en los que las bandas se tocan), aclaremos que cada vez que digamos *touching band points* nos referimos a los puntos en los cuales los bordes de banda se tocan. Por simplicidad, usaremos el acrónimo TBP para referirnos a los *touching band points* (es decir a \mathbf{k}^* , las soluciones de la ecuación $\tau\omega(\mathbf{k}^*, \tau) = n\pi$).

Para obtener los TBPs iniciamos por sustituir la condición $\tau\omega(\mathbf{k}^*, \tau) = n\pi$ en la ecuación (89), lo que resulta en la siguiente ecuación,

$$\pm 1 = \cos[\tau \delta h(\mathbf{k}^*)] \cos[\tau h_0(\mathbf{k}^*)] - \hat{\mathbf{h}}_0(\mathbf{k}^*) \cdot \delta \hat{\mathbf{h}}(\mathbf{k}^*) \sin[\tau \delta h(\mathbf{k}^*)] \sin[\tau h_0(\mathbf{k}^*)]. \quad (92)$$

Ahora el problema se ha resuelto a despejar \mathbf{k}^* de la ecuación anterior. Después de un análisis cuidadoso de la Ec. (92) uno se da cuenta que dicha ecuación sólo admite dos tipos de soluciones. El tipo de solución está determinado por el valor del producto punto dado por $\hat{\mathbf{h}}_0(\mathbf{k}^*) \cdot \delta \hat{\mathbf{h}}(\mathbf{k}^*)$. Los valores del producto punto que definen las posibles soluciones de la Ec. (92) son los siguientes,

1. $\hat{\mathbf{h}}_0(\mathbf{k}^*) \cdot \delta \hat{\mathbf{h}}(\mathbf{k}^*) = \pm 1$
2. $\hat{\mathbf{h}}_0(\mathbf{k}^*) \cdot \delta \hat{\mathbf{h}}(\mathbf{k}^*) \neq 1$ junto con $\cos[\tau \delta h(\mathbf{k}^*)] \cos[\tau h_0(\mathbf{k}^*)] = \pm 1$

A las soluciones 1 (2) las denominaremos TBPs tipo I (II). Observe que la condición 1, requiere que $\hat{\mathbf{h}}_0(\mathbf{k}^*) \cdot \delta \hat{\mathbf{h}}(\mathbf{k}^*) = \pm 1$, lo que es equivalente a pedir que $\hat{\mathbf{h}}_0(\mathbf{k}^*) \times \delta \hat{\mathbf{h}}(\mathbf{k}^*) = 0$. Lo que significa que para soluciones tipo I los Hamiltonianos Ec. (79) conmutan, véase Ec. (83). Por otro lado, las soluciones tipo II son más complejas, pues requieren que se cumplan dos condiciones a la vez. Ya que hemos encontrado las las soluciones de tipo I y de tipo II, el siguiente paso es encontrar las regiones del espacio de parámetros necesarias para que dichas soluciones existan. Encontrar

dichas condiciones es importante debido a que estas condiciones determinarán si el sistema es capaz o no de dar lugar a estados de borde con propiedades topológicas no triviales.

7.3. Soluciones tipo I

Consideraremos primero el caso de soluciones tipo I. Empezaremos notando que, como se mencionó anteriormente, pedir que $\hat{\mathbf{h}}_0(\mathbf{k}^*) \cdot \delta \hat{\mathbf{h}}(\mathbf{k}^*) = \pm 1$ es equivalente a pedir que $[H_0(\mathbf{k}^*), H_1(\mathbf{k}^*)] = 0$. De la ecuación (83) es fácil ver que dicho conmutador es cero siempre que $k_y^* = 0, \pm 2\pi/3$. Como es bien sabido la ecuación $k_y^* = 0, \pm 2\pi/3$ corresponde a los bordes de banda de la estructura electrónica de una nanocinta de grafeno con terminación zigzag sin deformar en el caso estático. Para obtener la componente x del cuasi momento es suficiente con sustituir $k_y^* = 0, \pm 2\pi/3$ en la ecuación (89), después de hacerlo y de un poco de cálculos algebraicos uno obtiene lo siguiente,

$$\tau\omega_{\pm}(k_x) = \tau\gamma_2 \pm 2\tau\gamma_1 \cos\left(\sqrt{3}k_x/2\right) \quad (93)$$

donde el signo ‘+’ corresponde al caso en el que $k_y^* = 0$ mientras que el signo ‘-’ corresponde a $k_y^* = \pm 2\pi/3$. Nótese que la ecuación (93) es lineal en τ , además, dicha ecuación representa los bordes de banda del espectro de cuasi energías (para este caso, dado que es una función de k_x , de la estructura de bandas). Ahora, con el fin de obtener la componente x de los TBPs tipo I debemos encontrar los puntos en los que los bordes de banda superior e inferior se tocan. Una vez más, esto ocurre siempre que $\tau\omega_{\pm}(k_x^*) = \pm n\pi$ (n un número entero). Si reemplazamos dicha condición en la ecuación (93) y resolvemos para k_x^* obtenemos dos soluciones que están dadas por,

$$\begin{aligned} k_x^{*(+)} &= \pm \frac{2}{\sqrt{3}} \arccos\left[\frac{n\pi - \tau\gamma_2}{2\tau\gamma_1}\right] \\ k_x^{*(-)} &= \pm \frac{2}{\sqrt{3}} \arccos\left[\frac{-n\pi + \tau\gamma_2}{2\tau\gamma_1}\right]. \end{aligned} \quad (94)$$

Al igual que antes, el signo ‘+’ corresponde al caso en el que $k_y^* = 0$ mientras que el signo ‘-’ corresponde a $k_y^* = \pm 2\pi/3$. Uno puede ver que las soluciones Ec. (94) siempre vienen en pares, similarmente al caso de puntos de Dirac o puntos de Weyl. Es importante mencionar que para $n = 0$ o n impar hay dos pares de soluciones mientras que para n para sólo tenemos un par de soluciones, pues para n par las dos soluciones mostradas en la Ec. (94) se vuelven iguales, como puede ser visto al sustituir explícitamente $n = 2j$ con j un número entero distinto de cero. Por otro lado, el caso $n = 0$ merece atención pues corresponde al límite estático del modelo. Para $n = 0$ obtenemos los puntos en los cuales las bordes de banda se tocan a energía cero, es decir, obtenemos los puntos de Dirac, sin embargo, dado que estamos considerando el caso de una nanocinta de grafeno con terminación zigzag deformada, los puntos de Dirac se encuentran desplazados de sus

posiciones originales debido al campo de deformación. Los puntos de Dirac poseen una fase de Berry distinta de cero sin embargo la carga topológica del grafeno es cero, esto se debe a que los puntos de Dirac siempre vienen en pares y cada punto dentro del par tiene una fase de Berry opuesta a la de su compañero lo que conduce a la cancelación de la carga topológica del sistema. Sin embargo, como es bien sabido, si se considera una nanocinta de grafeno con terminación zigzag finita, aparece una banda plana uniendo dos puntos de Dirac distintos (por distintos entendemos que los puntos de Dirac en consideración tienen fases de Berry opuestas), dichas bandas planas están protegidas topológicamente y por lo tanto son robustas ante perturbaciones pequeñas. Este hecho es cierto incluso cuando se considera grafeno deformados dependiente e independiente del tiempo. Más adelante veremos que los demás valores de n , es decir, n 's diferentes de cero también darán lugar a bandas planas topológicamente protegidas.

Una vez que las soluciones tipo I han sido obtenidas es conveniente obtener las condiciones necesarias para que dichas soluciones existan y, además, sean reales. Esta información nos proveerá la información necesaria para obtener el diagrama topológico de fases. Con el fin de que la ecuación (94) tenga soluciones reales, se debe de cumplir la siguiente condición,

$$|n\pi - \tau\gamma_2| \leq 2\tau\gamma_1. \quad (95)$$

Esto implica que hay un límite inferior en el valor del período de la modulación temporal, τ , debajo del cual no hay soluciones reales de la Ec. (94). Dicho valor, que denotaremos como τ_c , depende de los parámetros del campo de deformación vía los parámetros de salto γ_1 y γ_2 [ver Ec. (77)]. La forma explícita de τ_c puede ser obtenida del valor mínimo de τ necesario para que la Ec. (95) se cumpla, el cual está dado por la igualdad en la Ec. (95). Es decir, los valores de τ_c están dados por las soluciones de la siguiente ecuación,

$$\frac{n\pi}{\tau_c} \pm \gamma_2 = \mp 2\gamma_1 \quad (96)$$

De la ecuación anterior notamos que hay dos posibles valores diferentes para τ_c , dichos valores están dados por $\tau_c = n\tau_c^+$ o $\tau_c = n\tau_c^-$, los cuales están dados por,

$$\tau_c^+ = \frac{\pi}{2\gamma_1 + \gamma_2} \quad (97)$$

y

$$\tau_c^- = \frac{\pi}{|\gamma_2 - 2\gamma_1|}. \quad (98)$$

Ahora explicaremos por qué tenemos dos valores críticos τ_c . Lo que pasa es que τ_c^+ nos da la condición necesaria para obtener TBPs tipo I que surgen de los cruces de los bordes de banda exteriores, es decir, de los cruces entre $\pm\tau\omega_+(k_x)$, como se muestra en la Fig. 30. En dicha figura presentamos el espectro de cuasi energías como función de τ para $\lambda = 0,1$ y $k_x = 0$. Es importante

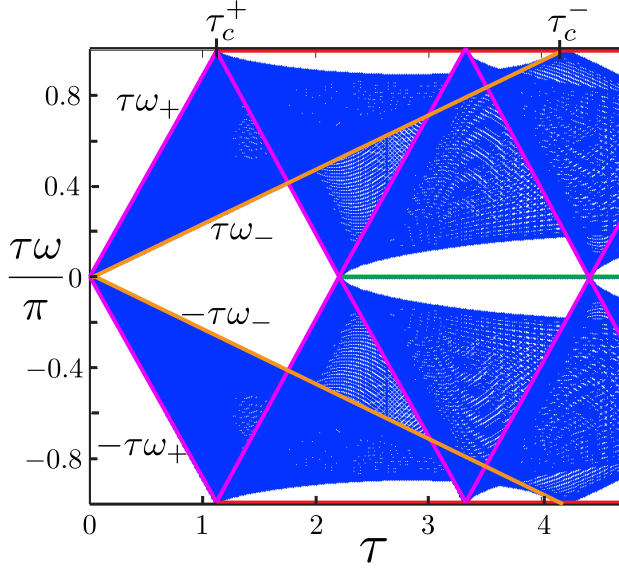


Figura 30: (Color online). Aquí presentamos los bordes de banda del espectro de cuasi energías como una función de τ , calculado usando las mismas condiciones que fueron usadas en la Fig. 26. El límite superior se indica por medio de líneas de color rosa y está etiquetado como $\pm\tau\omega_+$, mientras que el límite de banda inferior está indicado por líneas de color anaranjado y está etiquetada como $\pm\tau\omega_-$. Ambos bordes de banda, $\pm\tau\omega_+$ y $\pm\tau\omega_-$, fueron obtenidos de la Ec. (93). Los límites se tocan en $\tau_c = n\tau_c^+$ o $\tau_c = n\tau_c^-$ como se indica en la figura. Claramente estos estados de borde emergen cuando dos bordes de banda se tocan, por lo tanto estos estados tienen una naturaleza similar a la de los estados de Shockley.

mencionar que cada vez que τ es igual o mayor que un múltiplo entero de τ_c^+ un nuevo par de TBPs tipo I aparece. De manera similar, τ_c^- da los cruces de los bordes de banda interiores del espectro de cuasi energías, es decir, los cruces entre $\pm\tau\omega_-(k_x)$, ver la Fig. 30. Al igual que antes, cada vez que τ alcance un valor igual o mayor que τ_c^- aparecerá un nuevo par de TBPs tipo I. Nótese que cada vez que τ alcanza un múltiplo entero par de τ_c^+ o τ_c^- los bordes de banda se cruzan a cuasi energía cero, mientras que si es τ es un múltiplo entero impar de los valores críticos los bordes de banda se cruzaran a cuasi energías $\pm\pi$.

Ya que hemos obtenido las condiciones necesarias para obtener los TBPs tipo I, pasaremos a estudiar dos casos que merecen nuestra atención, a saber, $n = 0$ y $n \neq 0$ en la ecuación (94). El primer caso, $n = 0$, da lugar a TBPs a cuasi energía cero para cualquier valor de τ , por lo que uno puede decir que dichos TBPs tienen un origen independiente del tiempo. El segundo caso $n \neq 0$, es decir TBPs a cuasi energías cero y $\pm\pi$, los cuales tienen un origen dependiente del tiempo.

Primero estudiaremos *los TBPs tipo I independientes del tiempo*, es decir, estudiaremos el caso $n = 0$. Si sustituimos $n = 0$ en la ecuación (94) obtenemos,

$$k_x^{*(-)} = \pm \frac{2}{\sqrt{3}} \arccos \left[\frac{1 + \lambda/2}{2(1 - \lambda)} \right]. \quad (99)$$

Por lo tanto tenemos dos pares de TBPs tipo I para $n = 0$, un par para cada valor de k_y , ambos localizados en $\pm k_x^{*(-)}$. Más aún, de la estructura de la Ec. (99), uno encuentra que estos puntos son los conos de Dirac, los cuales se encuentran desplazados de su posición en grafeno puro debido al campo de deformación. Como veremos más adelante estos puntos darán lugar a la emergencia de bandas planas si la nanocinta se considera de tamaño finito a lo largo de la dirección y . Con el

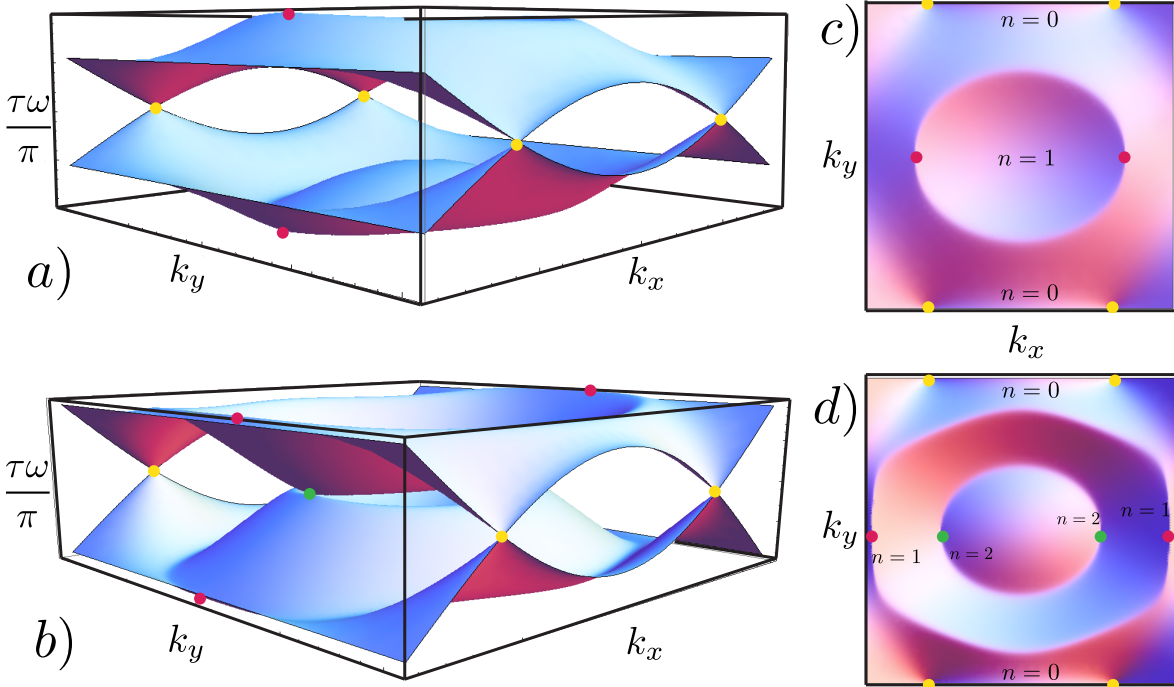


Figura 31: Panel izquierdo. Estructura de bandas obtenida de la Ec. (89) para a) $\tau = 1,5\tau_c^+$ y b) $\tau = 2,5\tau_c^+$ using $\lambda = 0,1$. En el lado derecho de la figura, en los paneles c) y d) se muestran las vistas superiores de las mismas estructuras de banda. Ahí los TBPs se ven claramente. En el panel c), el cual corresponde a $\tau = 1,5\tau_c^+$ hay dos pares de TBPs tipo I a quasi energía cero y un par de ellos a quasi energía $\pm\pi$, los cuales están representados por puntos amarillos y rojos, respectivamente. Como se probó en el texto principal, los puntos amarillos corresponde a los vértices de los conos de Dirac, los cuales tienen un origen independiente del tiempo. Por otro lado, los puntos rojos tienen un origen dependiente del tiempo. Para $\tau = 2,5\tau_c^+$ [ver el panel b)], los TBPs están a quasi energía cero (denotados con la etiqueta $n = 2$) y a quasi energías $\pm\pi$ (denotados con la etiqueta $n = 1$). Los conos de Dirac permanecen igual que en el panel a) y corresponden a $n = 0$.

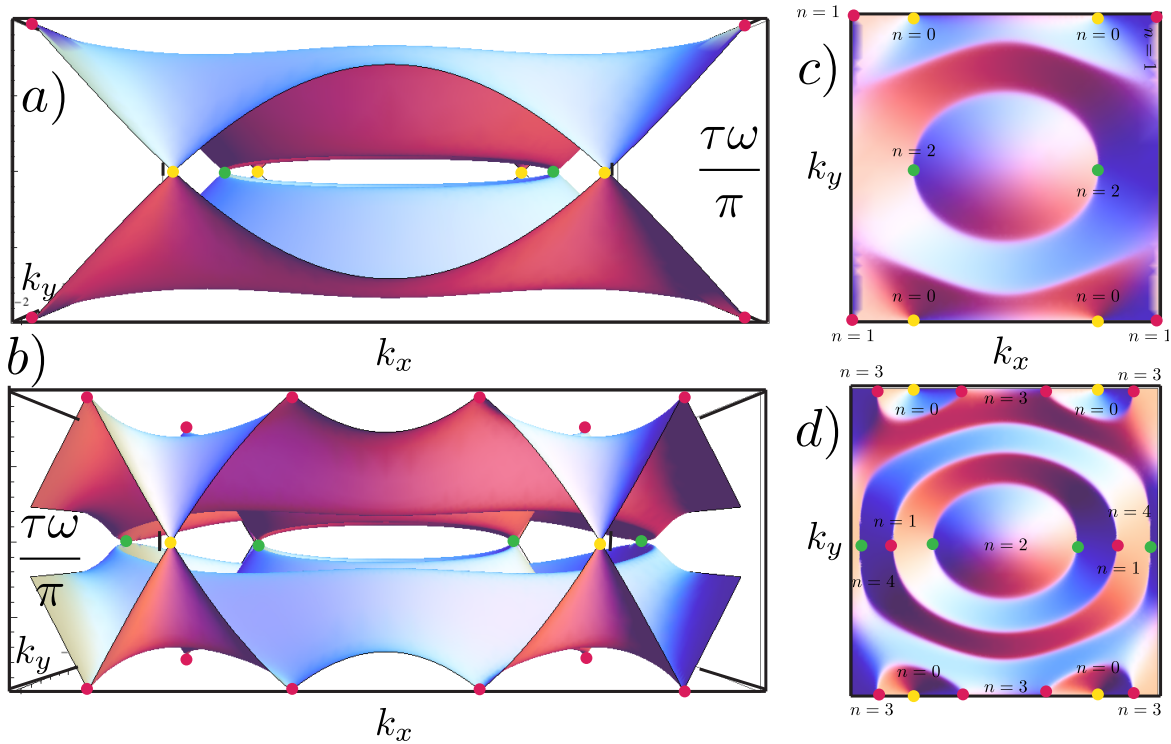


Figura 32: Panel izquierdo. Estructura de bandas obtenida por medio de la Ec. (89) para a) $\tau = 3$ y b) $\tau = 5,28$ usando las mismas condiciones que fueron usadas en la Fig. 31 y $\lambda = 0,1$. En el panel derecho se muestran las vistas superiores de las estructuras de bandas mostradas en el panel izquierdo. Nótese que en el panel a) tenemos $\tau < \tau_c^-$, por lo tanto hay dos pares de TBPs a quasi energía $\pm\pi$. Por otro lado, en el panel b) tenemos $\tau > \tau_c^-$ y dos nuevos pares de TBPs aparecen a quasi energía $\pm\pi$, ver el texto principal. Los parámetros usados para la realización de las gráficas son los mismos que los usados en las Figs. 27 y 28, las cuales fueron obtenidas por medio de la diagonalización numérica del operador de evolución temporal de un período. Se sigue que la gráfica aquí presentada confirma que los resultados analíticos y numéricos coinciden exactamente.

fin de ilustrar estos resultados, en las Figs. 31 y 32 presentamos la versión analítica de las Figs. 27 y 28. En las Figs. 31 y 32 se indican los conos de Dirac con círculos sólidos de color amarillo.

Toca el turno de analizar *los TBPs tipo I dependientes del tiempo*, es decir, el caso $n \neq 0$. Para este caso dos tipos de TBPs aparecen dependiendo de si n es par o impar. Dado que para los TBPs tenemos que $\tau\omega(\mathbf{k}^*, \tau) = n\pi$, se sigue que $\mathcal{U}(\mathbf{k}^*, \tau) = (-1)^n$. Luego, si n es impar tenemos que $\mathcal{U}(\mathbf{k}^*, \tau) = -1$, lo que significa que, debido a la periodicidad del espacio de Floquet, TBPs a cuasi energía $\pm n\pi$ (n un entero impar diferente de cero) son equivalentes a TBPs a cuasi energía $\pm\pi$. Igualmente, TBPs a cuasi energía $\pm n\pi$ (n un entero par diferente de cero) son equivalentes a TBPs a cuasi energía cero. En las Figs. 31 y 32 hemos etiquetado los TBPs independientes del tiempo para n impar con círculos sólidos rojos, mientras que los TBPs para n par han sido etiquetados con círculos verdes.

7.4. Soluciones tipo II

Antes que nada, primero encontraremos este tipo de soluciones. Para eso, dado que la condición $\cos[\tau\delta h(\mathbf{k}^*)] \cos[\tau h_0(\mathbf{k}^*)] = \pm 1$ debe ser cumplida, impondremos que $\tau\delta h(\mathbf{k}^*) = n_1\pi$ y $\tau h_0(\mathbf{k}^*) = n_2\pi$, donde n_1 y n_2 son número enteros. El siguiente paso es despejar k_x^* y k_y^* de las condiciones impuestas antes, después de algunas manipulaciones algebraicas, uno obtiene,

$$\begin{aligned} \cos(\sqrt{3}k_x^*/2) &= \pm \sqrt{\frac{\frac{n_1^2\pi^2}{\tau^2} - (\gamma_2 - 1)^2 + (\gamma_1 - 1)(\gamma_2 - 2) \left(1 - \frac{n_2^2\pi^2}{\tau^2}\right)}{4(\gamma_1 - 1)(\gamma_1 - \gamma_2)}}, \\ \cos(3k_y^*/2) &= \frac{n_2^2\pi^2 - 4\cos^2(\sqrt{3}k_x^*/2) - 1}{4\cos(\sqrt{3}k_x^*/2)}. \end{aligned} \quad (100)$$

Al igual que antes, las condiciones para que la ecuación (100) tenga soluciones reales tienen que obtenerse. Después de observar la ecuación (100) uno encuentra que con el fin de que tenga soluciones reales las siguientes condiciones deben cumplirse simultáneamente,

$$\begin{aligned} 0 \leq \frac{\frac{n_1^2\pi^2}{\tau^2} - (\gamma_2 - 1)^2 + (\gamma_1 - 1)(\gamma_2 - 2) \left(1 - \frac{n_2^2\pi^2}{\tau^2}\right)}{4(\gamma_1 - 1)(\gamma_1 - \gamma_2)} \leq 1 \\ \left| \frac{n_2^2\pi^2 - 4\cos^2(\sqrt{3}k_x^*/2) - 1}{4\cos(\sqrt{3}k_x^*/2)} \right| \leq 1. \end{aligned} \quad (101)$$

Es importante mencionar que este tipo de soluciones tendrán cuasi energía cero si n_1 es par y n_2 es impar o viceversa. Mientras que tendrán soluciones con cuasi energías $\pm\pi$ si n_1 y n_2 son ambos pares o ambos impares.

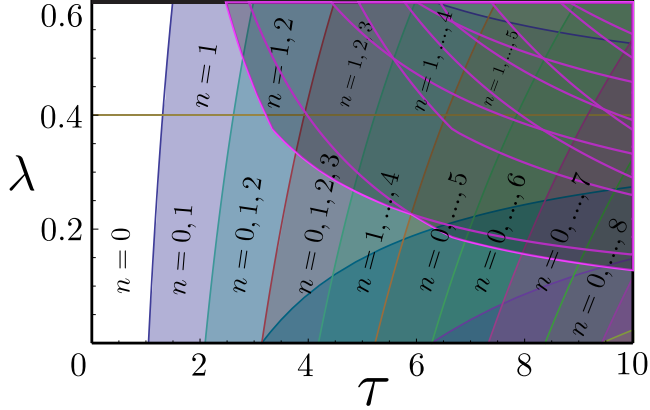


Figura 33: (Color online.) Diagrama de fase topológico, en donde los colores indican el valor permitido máximo de n . Aquí el número de estados de borde topológicamente no triviales incrementa conforme incrementa n . Las fronteras de las fases están determinadas por las ecuaciones (97) y (98), usando $\tau = n\tau_c^+$ y $\tau = n\tau_c^-$. La región sombreada que se encuentra delimitada por líneas color magenta corresponde a fases en la que no se observan bandas planas sino estados de borde dispersivos dadas por la condición $\hat{\mathbf{h}}_0 \cdot \hat{\mathbf{h}}_1 \neq 1$. Las fases con $\lambda < 0,4$ no tienen una brecha energética a cuasi energía cero para $\tau < 2\tau_c^+$.

7.5. Diagrama de fase topológico

Ya que hemos obtenido la ubicación de los TBPs de tipo I y de tipo II, nos es posible construir el diagrama de fase topológico de nuestro sistema. Para eso basta con graficar las ecuaciones (96) y (101) para diferentes valores de n y diferentes pares (n_1, n_2) . En la Fig. 33 presentamos el diagrama de fase topológico, ahí cada color representa una fase del sistema para los valores permitidos de n que corresponden a TPBs de tipo I. Por ejemplo, para $\lambda \leq 0,4$, el color blanco indica que únicamente hay un par de TPBs tipo I, pues n únicamente puede tomar un único valor, $n = 0$. En contraste, para la fase indicada con color violeta, tenemos dos pares de TPBs tipo I, pues n puede tomar dos valores, a saber, $n = 0$ (que corresponde a los puntos de Dirac) y $n = 1$ que es el caso de TPBs a cuasi energías $\pm\pi$. Por otro lado, las fases del sistema en las que uno puede encontrar TBPs de tipo II están indicadas en la Fig. 33 por medio de curvas de color magenta. Nótese que para alcanzar este tipo de fases del sistema es necesario utilizar amplitudes de la deformación muy grandes, lo que hace difícil su observación experimental pues a valores altos de la amplitud de deformación es sabido que los efectos no lineales se vuelven importantes y tienen que ser tomados en cuenta [20]. Por esas razón, en lo que sigue únicamente nos concentraremos en caracterizar topológicamente los TBPs de tipo I, lo cual será hecho en la siguiente sección.

7.6. Caracterización topológica de los estados de borde

La caracterización topológica de las soluciones tipo I de la ecuación (92) será hecha a lo largo de esta sección. Para ello hemos evaluado la fase de Berry de manera explícita para este tipo de soluciones. La forma en la que calculamos la fase de Berry es la siguiente, primero, nótese que cerca de las soluciones tipo I (esto es, cerca de los puntos \mathbf{k}) el operador de evolución temporal de un período, Ec. (82), puede ser descrito razonablemente bien si se consideran términos de orden cuadrático o menores en τ en su desarrollo en series de Taylor. Esto es posible ya que

cerca de las soluciones tipo I el conmutador Ec. (83) es casi cero. Para realizar el desarrollo en serie del operador de evolución temporal de un período Ec. (82) podemos usar la fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff. Si aplicamos dicha fórmula al operador definido en la Ec. (82) y nos quedamos a orden cuadrático en τ , uno obtiene,

$$\mathcal{U}(\mathbf{k}, \tau) \approx \exp \left\{ -i\tau H_1(\mathbf{k}) + \tau^2 [H_1(\mathbf{k}), H_0(\mathbf{k})]/2 \right\}. \quad (102)$$

Debido a que esto únicamente es válido en la vecindad de las soluciones tipo I, ahora desarrollamos la ecuación (102) alrededor de los puntos (k_x^*, k_y^*) . Después de algunos cálculos sencillos uno encuentra que la ecuación (102) puede ser escrita como,

$$\mathcal{U}(q_x, q_y, \tau) \approx \exp \left[-ih_T \hat{\mathbf{h}}_T \cdot \boldsymbol{\sigma} \right], \quad (103)$$

donde $q_x = k_x - k_x^*$, $q_y = k_y - k_y^*$, $h_T = |\mathbf{h}_T|$, y el vector \mathbf{h}_T está dado por,

$$\mathbf{h}_T = A(\lambda, \tau) q_x \hat{e}_x + B(\lambda, \tau) q_y \hat{e}_y + C(\lambda, \tau) q_z \hat{e}_z, \quad (104)$$

con

$$\begin{aligned} A(\gamma_1, \gamma_2, \tau) &= n\pi + \tau\gamma_1 \sqrt{3 + 3 \left(\frac{n\pi - \tau\gamma_2}{2\tau\gamma_1} \right)^2} \\ B(\gamma_1, \gamma_2, \tau) &= 3\tau\gamma_2/2 \\ C(\gamma_1, \gamma_2, \tau) &= \frac{3\tau}{4\gamma_1} (\gamma_1 - \gamma_2)(n\pi - \tau\gamma_2). \end{aligned} \quad (105)$$

Las propiedades topológicas del sistema en las cercanías de las soluciones tipo I están dadas por las propiedades topológicas del Hamiltoniano efectivo $h_T \hat{\mathbf{h}}_T \cdot \boldsymbol{\sigma}$. Esto es confirmado al notar que cerca de las soluciones tipo I tenemos que $h_T \approx \pm n\pi$ por lo que el operador de evolución temporal Ec. (103) puede ser escrito como,

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(q_x, q_y, \tau) &\approx \cos h_T - i \left(\hat{\mathbf{h}}_T \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) \sin(h_T) \\ &\approx \mathbf{1} - ih_T \left(\hat{\mathbf{h}}_T \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) \end{aligned} \quad (106)$$

De la ecuación anterior se sigue que las propiedades topológicas del sistema estarán dadas por el Hamiltoniano efectivo (104). Ahora continuemos con la evaluación de la fase de Berry, que se define como,

$$\gamma_C = \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{k} \quad (107)$$

donde $\mathbf{A} = -i \langle \psi_k | \nabla_k | \psi_k \rangle$ es la llamada conexión de Berry (una cantidad que es un invariante de norma), $|\psi_k\rangle$ son las eigenfunciones del Hamiltoniano, a una k dada, al que se le quiere calcular

la fase de Berry [en este caso el Hamiltoniano es el definido en la Ec. (104)] y $\nabla_k = (\partial_{k_x}, \partial_{k_y})$ es el operador gradiente en el espacio recíproco de nuestro sistema. Para obtener la fase de Berry necesitamos obtener las eigenfunciones del Hamiltoniano (104). Puede probarse que dichas eigenfunciones están dadas por las siguientes espinores,

$$\begin{aligned} |\psi_{q'}^\uparrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \frac{Cq'_y}{Bh_T}} \\ e^{i\xi\alpha_{q'}} \sqrt{1 - \frac{Cq'_y}{Bh_T}} \end{pmatrix} \\ |\psi_{q'}^\downarrow\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\xi\alpha_{q'}} \sqrt{1 - \frac{Cq'_y}{Bh_T}} \\ -\sqrt{1 + \frac{Cq'_y}{Bh_T}} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (108)$$

donde

$$\begin{aligned} q'_x &= q_x/A \\ q'_y &= q_y/B. \end{aligned} \quad (109)$$

y $\alpha_{q'}$ está dado por,

$$\alpha_{q'} = \tan^{-1} \left(\frac{q'_y}{q'_x} \right). \quad (110)$$

ξ puede tomar los siguientes valores: $\xi = +1$ que corresponde a $+k_x^{*(+)}$ y $\xi = -1$ que corresponde a $-k_x^{*(+)}$. Ya que hemos obtenido las eigenfunciones del Hamiltoniano (104), ya nos es posible calcular la conexión de Berry, por simplicidad únicamente el caso $\xi = 1$, el otro caso puede ser calculado de manera similar. Después de algunos cálculos algebraicos, uno obtiene que la fase de Berry está dada por,

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{C}{Bh_T} q'_y \right) \nabla_{q'} \alpha_{q'}, \quad (111)$$

donde

$$\nabla_{q'} \alpha_{q'} = \frac{-q'_y \hat{\mathbf{e}}_x + q'_x \hat{\mathbf{e}}_y}{(q'_x)^2 + (q'_y)^2}. \quad (112)$$

Por último calculamos la fase de Berry a lo largo de una circunferencia centrada en $q'_x = q'_y = 0$. Si usamos coordenadas polares definidas como $q'_x = q' \cos \theta$ y como $q'_y = q' \sin \theta$ donde $(q')^2 = (q'_x)^2 + (q'_y)^2$, entonces calcular la fase de Berry es muy sencillo, de hecho uno obtiene lo siguiente,

$$\begin{aligned} \gamma_C &= \int_0^{2\pi} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{q}' \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \left(1 - \frac{\frac{C}{B} \sin \theta}{\sqrt{1 + \frac{C^2}{B^2} \sin^2 \theta}} \right) d\theta = \pi. \end{aligned} \quad (113)$$

Un cálculo similar puede realizarse para $k_x^{*(-)}$, dicho cálculo da como lo resultado que $\gamma_C = -\pi$. Después de haber encontrado que la fase de Berry es diferente de cero alrededor de las soluciones tipo I y de encontrar que cada par de soluciones tiene fase de Berry cero pues cada solución tiene una fase de Berry negativa a la de su compañero, el origen de las bandas planas queda claro; de hecho su origen es similar al de las bandas planas que aparecen en las nanocintas de grafeno con terminación zigzag [82, 118] y al de las bandas planas que emergen en semi metales de Weyl (la versión tridimensional de los semi metales de Dirac). Las bandas planas encontradas en este capítulo unen dos soluciones distintas, esto es, con fases de Berry opuestas. Sin embargo, para el caso especial de modulación resonante, estos es, para los casos en los que el período de la modulación toma los siguientes valores $\tau = m\tau_c$ (m un número entero diferente de cero), siempre tenemos únicamente una solución tipo I, no un par de ellas como en los demás casos. Dicha solución tendrá cuasi energía cero o $\pm\pi$ dependiendo de si m es par, impar o cero. Para estos valores de τ la fase de Berry es cero. Si el valor de τ es incrementado un poco, este único punto con fase de Berry cero se desdobra en dos puntos cada uno de los cuales tiene una fase de Berry diferente de cero pero con un valor opuesto al de su compañero. Por lo tanto, si el sistema es finito, una banda plana uniendo dichos puntos aparecerá. Por otro lado, note que el término en la dirección z en el Hamiltoniano efectivo es proporcional al conmutador Ec. (83). Por lo tanto, cuando estamos justo en las soluciones tipo I, el término de masa del Hamiltoniano efectivo (104) es cero (el término de masa es aquel que está a lo largo de la dirección z). Sin embargo, si nos alejamos un poco de dicho punto, el conmutador ya no es cero y una masa efectiva aparece, lo que conduce a la aparición de una brecha energética secular en la estructura de bandas del sistema. Por último, es importante remarcar que debido a que las soluciones tipo I tienen una fase de Berry distinta de cero, las bandas planas que las unen son robustas ante perturbaciones pequeñas pues tienen propiedades topológicas no triviales.

7.7. Posible realización experimental

En esta sección se discutirán la posible realización experimental de nuestro modelo. Iniciaremos por estimar el la frecuencia de la modulación temporal mínima necesaria para observar los resultados obtenidos a lo largo de esta parte de la tesis. Usando la Ec. (97) el valor crítico del período de la modulación temporal al cual las bandas planas emergen es,

$$T = \frac{2\pi\hbar n}{3(2 - \lambda)}. \quad (114)$$

Si uno introduce todos los valores numéricos, se obtiene un período de la modulación temporal de $T \approx n \times 10^{-16}$ s. Este período de la modulación es demasiado pequeño, sin embargo, escala con n . A pesar de que obtener este tipo de frecuencias puede ser complicado en situaciones reales, proponemos algunos experimentos para realizarlos. El primer experimento que viene a la

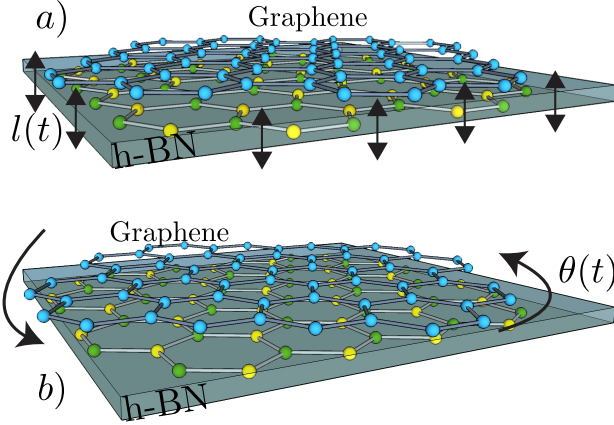


Figura 34: En esta figura presentamos dos experimentos propuestos para la observación de las bandas planas en nanocintas de grafeno deformadas con terminación zigzag. Como se muestra, esto puede ser realizado colocando una monocapa de grafeno sobre nitruro de boro hexagonal (h-BN). Después, uno puede mover el sustrato hacia arriba y hacia abajo (a) o torcerlo (b) por medio de un motor muy rápido.

mente es la aplicación de un campo de deformación periódicamente en el tiempo en los bordes de una nanocinta de grafeno. Desafortunadamente, dicho experimento no sería útil para observar los resultados aquí obtenidos pues las deformaciones, en grafeno, se transmiten por medio de fonones, los cuales tienen una frecuencia característica muy cercana al período de la modulación obtenido arriba. Sin embargo, hay otro tipos de experimentos que pueden ser llevados a cabo. Por ejemplo, uno puede colocar una nanocinta de grafeno sobre un sustrato de nitruro de boro hexagonal (h-BN), después el sustrato puede ser movido por medio de dispositivos muy rápidos, como piezo eléctricos. En la Fig. 34 a) mostramos un experimento de este tipo, donde lo que se varía periódicamente en el tiempo es la distancia entre el grafeno y el h-BN, dicha distancia es denotada por $l(t)$ en la figura. Otro experimento posible consiste en cambiar la orientación relativa entre el grafeno y el sustrato, dicho arreglo experimental es mostrado en la Fig. 34 b), en donde la orientación relativa entre el sustrato y el grafeno es denotada por $\theta(t)$. La ventaja de este tipo de experimentos es que el campo de deformación es aplicado de manera instantánea en todos los sitios de la red del grafeno por lo que los fonones no son necesarios para generar el campo de deformación.

No obstante, la modulación en el límite de pulsos ultra cortos puede ser muy difícil de obtener experimentalmente. Por lo tanto, es conveniente estudiar otro tipo de deformación, a saber, una modulación temporal tipo sinusoidal como la siguiente,

$$\begin{aligned} \gamma_j(t) &= \gamma_0 \\ &+ \cos(\Omega t) \gamma_0 \lambda \xi(j+1) \sin[\pi \sigma \xi(j)] \sin(2\pi \sigma j + \phi). \end{aligned} \quad (115)$$

Se sigue que el Hamiltoniano dependiente del tiempo toma la siguiente forma,

$$H(t) = H_0 + \cos(\Omega t) H_1, \quad (116)$$

donde

$$H_0 = \gamma_0 \sum_{j=1}^{N-1} \left[a_{2j+1}^\dagger b_{2j} + c(k_x) a_{2j-1}^\dagger b_{2j} \right] + \text{h.c.}$$

$$H_1 = \sum_{j=1}^{N-1} \left[\delta\gamma_{2j} a_{2j+1}^\dagger b_{2j} + c(k_x) \delta\gamma_{2j-1} a_{2j-1}^\dagger b_{2j} \right] + \text{h.c.}$$

donde $\delta\gamma_j = \gamma_j - \gamma_0$, ver Ec. (77). Debido a que $H(t+T) = H(t)$ (con $T = 2\pi/\Omega$), el teorema de Floquet nos dice que las funciones de onda de $H(t)$ pueden ser escritas en términos de la frecuencia fundamental Ω como,

$$|\psi_{nj}(\mathbf{k}, t)\rangle = e^{-i\epsilon_n(\mathbf{k})t/\hbar} \sum_{m=-\infty}^{\infty} |\varphi_{n,j}^{(m)}\rangle e^{im\Omega t}, \quad (117)$$

donde los coeficientes $|\varphi_{n,j}^{(m)}\rangle$ en el sitio j satisfacen la ecuación independiente del tiempo de Schrödinger,

$$\sum_{j',m'} \mathcal{H}_{j,j'}^{m,m'} |\varphi_{n,j'}^{(m')}\rangle = \epsilon_n |\varphi_{n,j}^{(m)}\rangle, \quad (118)$$

aquí \mathcal{H} , el llamado Hamiltoniano de Floquet, está dado por,

$$\mathcal{H}_{j,j'}^{m,m'} = m\Omega \delta_{m,m'} + \frac{1}{T} \int_0^T e^{-i(m-m')\Omega t} H(t) dt. \quad (119)$$

observe que la Ec. (118) tiene soluciones para cada valor de \mathbf{k} en el intervalo $-\infty \leq \epsilon_n \leq \infty$. Sin embargo, para nuestros propósitos, Es suficiente considerar la primera zona de Brillouin del espacio de Floquet, es decir, $-\pi \leq \tau\epsilon_n \leq \pi$, con $\tau = T/\hbar$.

Para un Hamiltoniano como el mostrado en la Ec. (116), el Hamiltoniano de Floquet, Ec. (119), es una matriz tridiagonal por bloques, en la cual cada bloque es una matriz de tamaño $N \times N$. Lo eigenvalores del Hamiltoniano de Floquet, a primera aproximación, están bien descritos si únicamente se considera que el valor de m se encuentra en el rango $-1 \leq m \leq 1$. En la Fig. 35 mostramos el espectro de cuasi energías del Hamiltoniano $\mathcal{H}_{j,j'}^{m,m'}$ para $-1 \leq m \leq 1$, $\lambda = 0,1$, $\tau = 3$, $\sigma = 1/2$, $\phi = 4\pi\sigma/3$ y $N = 240$, calculado usando condiciones de frontera fijas. En dicha figura puede observarse que las bandas planas que unen dos conos de Dirac emergen como en el caso de una modulación temporal tipo delta, sin embargo, las bandas planas que emergen debido a la dependencia temporal a cuasi energía cero casi se han mezclado con las bandas del bulto (ver Fig. 35, en donde dichas bandas planas se indican por medio de líneas sólidas verdes). Por otro lado, los estados de borde que aparecen en las fronteras de la primera zona de Brillouin del espacio de Floquet siguen apareciendo pero ya no son bandas planas sino estados de borde dispersivos, como puede observarse en la Fig. 35, en donde se muestran dichos estados con líneas

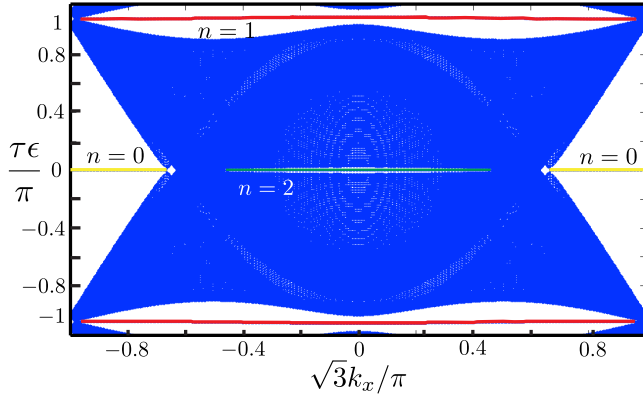


Figura 35: Espectro de cuasi energías obtenido de la Ec. (119) para $\tau = 3$, $\lambda = 0,1$, $\sigma = 1/2$, $\phi = 4\pi\sigma/3$, $N = 240$ y usando condiciones de frontera fijas. Los estados de borde para $n = 0$ (que son bandas planas de origen independiente del tiempo que aparecen a cuasi energía cero) están indicados con líneas de color amarillo, mientras que los estados a cuasi energías $\pm\pi$ (a cuasi energías cero) están representados con líneas de color rojo (líneas de color verde). Nótese que las brechas energéticas seculares que separan a los estados de borde dependientes del tiempo son más pequeñas en comparación con el caso en el que la modulación temporal es del tipo delta de Dirac, ver la Fig. 27. Adicionalmente, los estados de borde a cuasi energía $\pm\pi$ ya no son bandas planas sino estados de borde dispersivos.

sólidas rojas. De la estructura de bandas mostrada en la Fig. 35 parece que la brecha energética secular que separa los estados de borde de las bandas del bulto tiene un tamaño menor en el caso de una modulación temporal tipo coseno si se compara con el caso de una modulación temporal tipo función delta (esto es, el límite de pulsos ultra cortos). Para aclarar el punto anterior es necesario comparar el tamaño de las brechas energéticas que separan las bandas planas en los casos de modulación temporal tipo coseno y en el caso de modulación temporal tipo función delta. Para este fin hemos elegido comparar las brechas energéticas de los estados de borde que aparecen a cuasi energías $\pm\pi$ debido a que para estos estados la brecha energética está mejor definida que para el caso de los estados de borde que emergen a cuasi energías ceros en el caso de modulación temporal tipo coseno. Si elegimos $k_x = 0$ como el punto al cual se medirá el tamaño de la brecha energética tenemos que la brecha energética para el caso de una modulación temporal tipo delta es de $\Delta \approx 0,1$ eV, mientras que para el caso de modulación temporal tipo coseno en $k_x = 0$ la brecha energética tiene un tamaño de $\Delta \approx 0,05$ eV. Lo anterior nos indica que el tamaño de la brecha energética en el caso de una modulación temporal tipo delta es dos veces mayor que el tamaño de la brecha energética que se obtiene si se considera una modulación temporal tipo coseno. Por lo tanto, para el caso de modulación temporal tipo coseno, es más complicado observar los estados de borde de manera experimental.

Afortunadamente, incluso en el peor escenario, es decir, en el caso en el que los experimentos aquí propuestos no pudieran ser realizados en el laboratorio, las redes artificiales son excelentes candidatos para la observación experimental de los resultados obtenidos a lo largo de esta parte de la tesis. Otra alternativa es inducir deformaciones mecánicas en grafeno vía luz, en este caso las frecuencias a las cuales se cambia la luz para inducir deformaciones en grafeno son del orden de los períodos necesario para obtener los resultados aquí obtenidos.

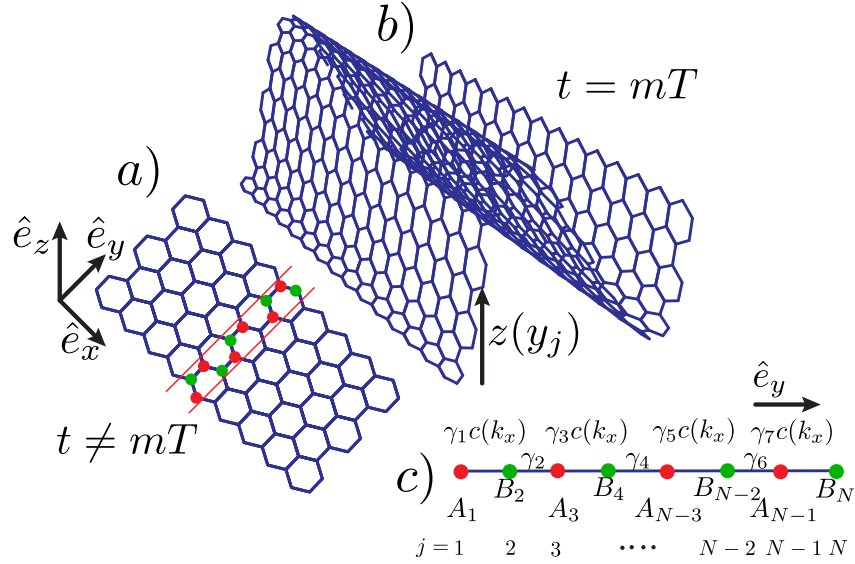


Figura 36: Representación esquemática de la modulación temporal tipo delta de Dirac. El campo de deformación está apagado para tiempos tales que $t \neq mT$, donde m es un número entero y T es el período de la modulación. Está situación se muestra en el panel a), ahí puede verse una nanocinta de grafeno con terminación zigzag que es de tamaño finito a lo largo de la dirección y pero que es de tamaño infinito a lo largo de la dirección x . La unitaria de la nanocinta se indica dentro de líneas rojas. Los átomos que pertenecen a la sub red A (B) están representados por círculos de color rojo (verde). Por otro lado, para $t = mT$ el campo de deformación se encuentra encendido como se indica en el panel b). Nótese que la distancia entre átomos para la nanocinta deformada es la misma que en el caso de una nanocinta sin deformar, el único cambio es la altura de dichos átomos que ahora está dada por $z(y_j)$. Para finalizar, diremos que ambas nanocintas, la deformada y la no deformada, pueden ser vistas como cadenas unidimensionales efectivas. El mapeo de la nanocinta deformada a una cadena unidimensional es mostrado en el panel c), en donde se ha usado el mismo código de color que en el panel a). Los parámetros de salto en la cadena unidimensional están denotados por γ_j , donde j enumera a los átomos a lo largo de la celda unitaria del sistema.

8. Deformación dentro del plano de la nanocinta

En el capítulo anterior hemos estudiado cómo es que cambian las propiedades electrónicas de una nanocinta de grafeno sometida a una deformación dentro del plano (la cual es periódica en el espacio) que se aplica de manera pulsada. Para ese caso encontramos bandas planas que están protegidas topológicamente, ver el capítulo 7 para más detalles. En este capítulo estudiaremos un modelo muy similar al estudiado en el capítulo 7, la única diferencia entre ambos modelos es que en este capítulo consideraremos el caso en el que el campo de deformación aplicado a la nanocinta de grafeno es una corrugación, es decir el campo de deformación es igual al que se estudio en el capítulo 6 pero ahora aplicado de manera pulsada en el tiempo.

Iniciaremos con una nanocinta de grafeno con terminación zigzag como la mostrada en la Fig. 36 a). Después suponga que modificamos la altura de los átomos de dicha nanocinta, ver Fig. 36 b), de tal manera que ahora sus alturas están dadas por,

$$z_j = z(y_j) = \lambda \cos(2\pi\sigma y_j + \phi), \quad (120)$$

donde λ es la altura máxima de la corrugación, σ es la frecuencia espacial de la corrugación, ϕ es la fase de la corrugación y y_j es la componente y de las posiciones de los átomos dentro de la celda unitaria de la nanocinta, ver Fig. 36 a) en donde la celda unitaria se encuentra limitada por líneas sólidas rojas. Las propiedades electrónicas de la nanocinta mostrada en la Fig. 36 b), como ya hemos visto en el capítulo 6, están bien descritas, en el límite de bajas energías, por un Hamiltoniano efectivo unidimensional de amarre fuerte a primeros vecinos. Dicho Hamiltoniano efectivo es equivalente al Hamiltoniano de una cadena unidimensional como la mostrada en la Fig. 36 c) y tiene la siguiente forma,

$$H_1(k_x) = \sum_{j=1}^{N-1} \left[\gamma_{2j} a_{2j+1}^\dagger b_{2j} + c(k_x) \gamma_{2j-1} a_{2j-1}^\dagger b_{2j} \right] + \text{h.c.}, \quad (121)$$

al igual que en el capítulo anterior, $c(k_x) = 2 \cos(\sqrt{3}k_x/2)$, a_j (b_j) aniquila un electrón en el sitio j de la celda unitaria de la nanocinta y N es el número de átomos por celda unitaria. La definición general de los parámetros de salto para cualquier tipo de deformación uniaxial está dada en la Ec. (53). Para el caso de una deformación uniaxial periódica como la mostrada en la Ec. (120) los parámetros de salto ahora están dados por la Ec. (61). Aunque es posible estudiar nuestro sistema para un amplio rango de valores de σ y ϕ hemos elegido uno de los casos más simples, es decir, elegimos valores de σ y ϕ de tal suerte que los parámetros de salto dados por la Ec. (61) únicamente tengan dos valores distintos. Eso puede ser logrado si hacemos $\sigma = 1/3$ y $\phi = 0$. Para este caso los parámetros de salto toman la siguiente forma,

$$\gamma_j = \left(1 + \alpha - \frac{\alpha}{\sqrt{\frac{\pi^2 \lambda^2}{3} + 1}} \right) \exp \left[\beta \left(1 - \sqrt{\xi_j \lambda^2 + 1} \right) \right], \quad (122)$$

donde $\xi_j = 1/4$ para j impar y para los casos restantes, $\xi_j = 3/2$, $\alpha \approx 0,4$ es una constante que toma en cuenta el cambio en la orientación relativa de los orbitales π inducida por el campo de deformación que está fuera del plano, ver capítulo 6.

Ya que hemos dado un breve repaso a las propiedades electrónicas de una nanocinta de grafeno corrugada toca el turno de introducir la dependencia temporal a nuestro modelo. La dependencia temporal será de la misma forma a la considerada en el capítulo 7. Aquí consideraremos el siguiente Hamiltoniano dependiente del tiempo,

$$H(k_x, t) = \begin{cases} H_0(k_x) & \text{if } t < \text{mod}(t, T) < t_1 \\ H_1(k_x) & \text{if } t_1 < \text{mod}(t, T) < T \end{cases} \quad (123)$$

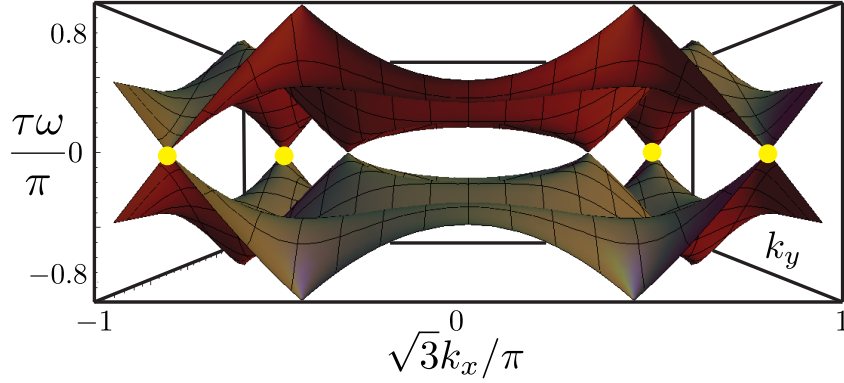


Figura 37: (Color online). Estructura de bandas de la cuasi energía como función de \mathbf{k} para $\sigma = 1/3$, $\phi = 0$, $\lambda = 0,5$ y $\tau = \pi$ obtenida de la Ec. (89). Observe que además de los conos de Dirac (los cuales están desplazados de su posición original debido al campo de deformación), indicados con puntos amarillos, hay otra especie de conos que también tiene dispersión lineal cerca de cuasi energía cero y/o $\pm\pi$.

donde T es el período de la modulación y t_1 es un tiempo tal que $0 \leq t_1 \leq T$. $H_0(k_x)$ es el Hamiltoniano de la nanocinta de grafeno con terminación zigzag sin deformar y está dado por,

$$H_0(k_x) = \sum_{j=1}^{N-1} \gamma_0 \left[a_{2j+1}^\dagger b_{2j} + c(k_x) a_{2j-1}^\dagger b_{2j} \right] + \text{h.c.},$$

mientras que el Hamiltoniano $H_1(k_x)$ corresponde al Hamiltoniano de una nanocinta de grafeno con terminación zigzag sometida a una deformación como la considerada al inicio de este capítulo y está dado por la ecuación (121). Para simplificar los cálculos y con el fin de obtener resultados analíticos consideraremos el límite de pulsos ultra cortos, esto es, estudiaremos el límite $t_1 \rightarrow T$ (ver capítulo 7 para una discusión detallada acerca de las implicaciones de utilizar este límite). Para ese límite la modulación utilizada puede ser modelada por medio de una función delta de Dirac de la siguiente manera,

$$H(k_x, t) = H_0(k_x) + \sum_m [H_1(k_x) - H_0(k_x)] \delta(t/T - m), \quad (124)$$

donde m es un número entero. Observe que este modelo es básicamente igual al que hemos estudiado en el capítulo 7, de hecho, la única diferencia entre ambos modelos son los parámetros de salto, sin embargo todos los resultados encontrados en el capítulo anterior fueron expresados en términos de γ_1 y γ_2 sin utilizar su definición precisa, únicamente bastaba con que fuesen dos parámetros de salto distintos. Por lo tanto, todos los resultados obtenidos en el capítulo 7 pueden ser usados aquí de manera directa.

Ya que es posible utilizar de manera directa todos los resultados obtenidos en el capítulo anterior, comenzaremos por graficar la estructura de bandas del sistema estudiado aquí de la

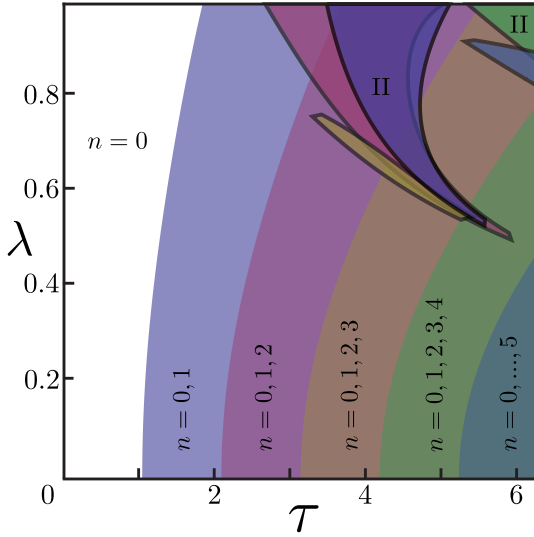


Figura 38: Diagrama de fase topológico del sistema para $\sigma = 1/3$ y $\phi = 0$ obtenido usando las expresiones analíticas Ecs. (95) y (101). Se observa la emergencia de dos tipos de TBPs de tipo I para cada valor de n . Cada color, de la misma manera, representan un valor de n . Las regiones que no están etiquetadas con la letra n y que están rodeadas por líneas gruesas negras corresponden a TBPs de tipo II. Como puede verse, el diagrama de fase topológico para TBPs de tipo II es muy complejo y se localiza a valores grandes de la amplitud del campo de deformación. Por lo tanto, su observación experimental puede ser difícil.

expresión analítica de las cuasi energías del sistema Ec. (89) utilizando los parámetros de salto definidos en la ecuación (122). En la Fig. 37 mostramos la estructura de bandas de la cuasi energía obtenida de la expresión analítica Ec. (89) usando los parámetros de salto (122) para $\sigma = 1/3$, $\phi = 0$, $\lambda = 0,5$ y $\tau = \pi$. Observe que además de los conos de Dirac (indicados con círculos amarillos en la figura), otro tipo de conos aparece a cuasi energías cero y $\pm\pi$.

Al igual que antes, el sistema estudiado aquí es capaz de soportar dos tipo de TBPs, los cuales son los mismo que antes, es decir, tipo I y tipo II. En la Fig. 38 presentamos el diagrama de fase topológico del sistema que se ha considerado a lo largo de este capítulo, dicho diagrama fue obtenido de las ecuaciones (??) y (101). Observe que dicho diagrama de fase fue construido en términos de la amplitud del campo de deformación y en términos del período de la modulación temporal. En la Fig. 38 las soluciones de tipo I están etiquetadas con la letra n y cada valor de n da lugar a dos pares de este tipo de soluciones. Por ejemplo, la región etiquetada por $n = 0, 1$ tiene cuatro pares de soluciones, dos debidas a $n = 1$ a cuasi energía $\pm\pi$ y otras dos para $n = 0$ (puntos de Dirac, como se discutió arriba) a cuasi energía cero. Además, observe como cada valor de n corresponde a una región bien definida del diagrama de fase. Ahora veamos que pasa con las soluciones de tipo II. Para este tipo de soluciones las cosas son mucho más complicadas debido a que cada diada de enteros (n_1, n_2) dan lugar a regiones complejas en el diagrama de fase, como puede verse en la Fig. 38 en donde las regiones correspondientes a este tipo de soluciones están indicadas dentro de contornos negros sólidos y están etiquetadas con el símbolo II. Por otro lado, nótese que para alcanzar las regiones de las soluciones tipo II, se requieren valores altos de la amplitud del campo de deformación, lo que vuelve complicada su observación experimental.

8.1. Estados de borde

En esta sección se discutirán los estados de borde que emergen de las soluciones de la ecuación (92) y sus propiedades topológicas para el caso en el que se considera una nanocinta de grafeno con terminación zigzag que tiene un tamaño finito. Para hacer esto, hemos obtenido el espectro de energía para una nanocinta finita, esto fue hecho por medio de la diagonalización numérica de la representación matricial del operador de evolución temporal de un período dado por la Ec. (74) como una función de k_x manteniendo los demás parámetros constantes y usando condiciones de frontera fijas.

Soluciones tipo I

Comenzaremos estudiando los estados de borde que emergen de soluciones tipo I. En la Fig. 39 b) presentamos la estructura de bandas del sistema como función de k_x para $\sigma = 1/3$, $\phi = 0$, $\lambda = 0,5$, $\tau = \pi$ y $N = 164$, obtenido por medio de la diagonalización numérica de la ecuación (74) usando condiciones de frontera fijas. Los colores en la Fig. representan el logaritmo de la razón de participación normalizada, en pocas palabras, los colores son una medida de la localización de las funciones de onda del sistema [básicamente, el color azul representa funciones de onda totalmente extendidas; mientras que el color rojo representa funciones de onda altamente localizadas cerca de los bordes de la nanocinta de grafeno, ver la discusión que sigue a la definición del NPR en la Ec. (26)]. Se han usado las mismas condiciones que en la Fig. 37 que fue obtenida por medio de la expresión analítica de las cuasi energías, Ec. (89). Observe como ambos gráficos coinciden de manera excelente. Por otro lado, en la Fig. 39 a) se muestra el *winding* del vector unitario definido en la Ec. (91) para $k_x = 0,9\pi/\sqrt{3}$, este punto fue elegido de modo que únicamente hubiera una banda plana uniendo dos conos de Dirac no equivalentes. Como puede verse en la figura, el número de *winding* es uno, como se espera de las propiedades topológicas de una nanocinta finita de grafeno con terminación zigzag sin deformar.

Observe que a pesar de que las figuras 37 y 39 fueron obtenidas bajo las mismas condiciones, esto es, se usó el mismo conjunto de parámetros para obtenerlas, ambas figuras son muy distintas. Esto se debe a que la Fig. 37 es una representación tridimensional de la estructura de bandas del sistema como función del cuasi momento \mathbf{k} , mientras que la Fig. 39, obtenida para el caso de una nanocinta finita, es una proyección de la estructura de bandas tridimensional sobre la componente x del cuasi momento. También nótese que el número de puntos en el que las bandas se tocan a cuasi energía cero y $\pm\pi$ es diferente para cada una de las figuras (ver Fig.37 y 39), esto se debe, básicamente, a que en la Fig. 37 estamos viendo una vista tridimensional de la estructura de bandas, mientras que en la Fig. 39 únicamente observados una vista plana, esto es, bidimensional de la estructura de bandas, por lo tanto los puntos en los cuales las bandas se tocan a cuasi energías cero y $\pm\pi$ vistos en la Fig. 37 quedan superpuestos en la Fig. 39. Finalmente, la diferencia más importante entre ambas figuras es el hecho de que en la Fig. 39 estados de borde

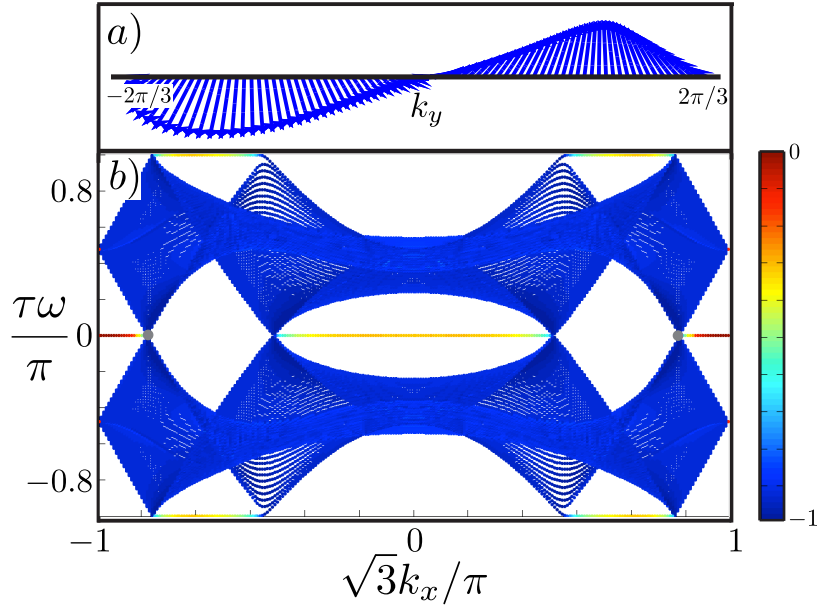


Figura 39: En el panel a) presentamos el *winding* del vector unitario $\hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(\mathbf{k})$, el cual fue obtenido de la expresión analítica Ec. (91) usando $k_x = 0,9\pi/\sqrt{3}$. El número de *winding* que emerge de estados de borde que unen dos conos de Dirac diferentes es uno. En el panel b) se presenta la estructura de bandas del espectro de quasi energías obtenido de la diagonalización numérica de la Ec. (74) como una función de k_x para $\sigma = 1/3$, $\phi = 0$, $\lambda = 0,5$, $\tau = \pi$ y para una nanocinta con $N = 164$ por celda unitaria, además se usaron condiciones de frontera fijas. Nótese la excelente coincidencia entre los resultados numéricos y los analíticos mostrados en la Fig. 37. Adicionalmente, observe que hay bandas planas a quasi energías cero y $\pm\pi$, como predice el diagrama de fase topológico mostrado en la Fig. 38 para TBPs de tipo I con $n = 0, 1, 2$. Para $n = 0$ tenemos los puntos de Dirac (indicados por puntos grises), los cuales están desplazados de su posición original debido a la presencia del campo de deformación. Los colores en la gráfica representan el NPR [ver ecuación 26], el color azul corresponde a estados totalmente extendidos, mientras que el color rojo corresponde a estados completamente localizados en las cercanías de los bordes de la nanocinta.

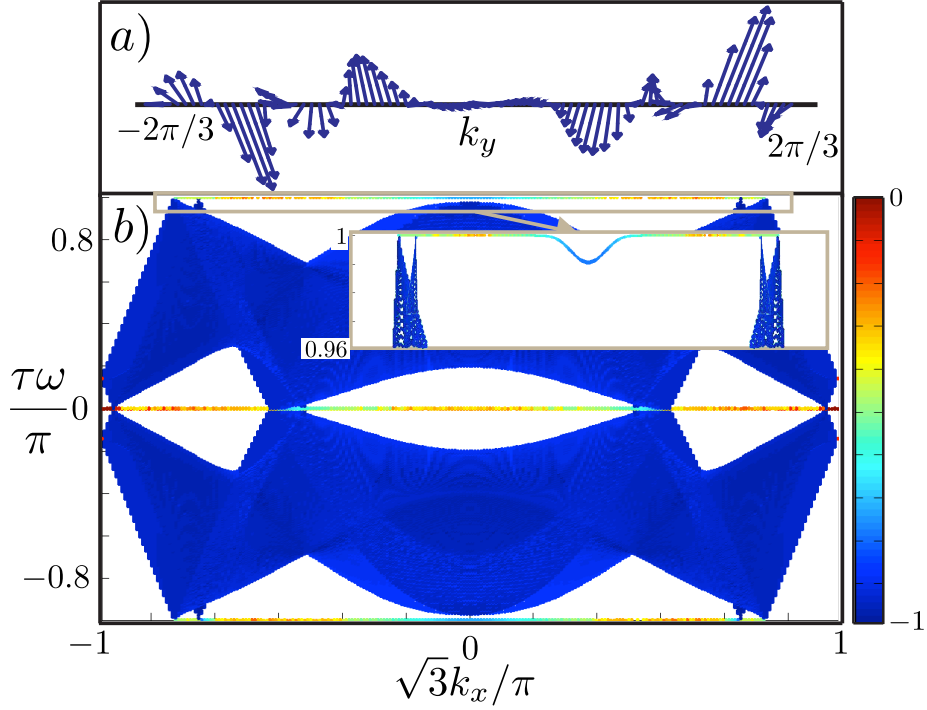


Figura 40: En el panel a) se muestra el *winding* del vector unitario $\hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(\mathbf{k})$ obtenido de la expresión analítica Ec. (91) para $k_x = 0,9\pi/\sqrt{3}$, $\sigma = 1/3$, $\phi = 0$, $\tau = 5,46$ y $\lambda = 1$. Al fijar k_x lo que estamos haciendo es estudiar una rebanada unidimensional de nuestro sistema. Las propiedades topológicas de dicha rebanada unidimensional están dadas por el número de *winding* del vector unitario $\hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(\mathbf{k})$. Si el número de *winding* es diferente de cero el sistema tiene propiedades topológicas no triviales. Nótese que el número de *winding* para este caso particular es 6. En el panel b) se muestra la estructura de bandas de las cuasi energías obtenida de la diagonalización numérica de la Ec. (74) como una función de k_x para $\sigma = 1/3$, $\phi = 0$, $\tau = 5,46$, $\lambda = 1$ y $N = 164$, obtenida usando condiciones de frontera fijas. Se usó el mismo código de color que el usado en la Fig. 39. Observe que para TBP's de tipo II las bandas planas están menos localizadas que en el caso de TBP's de tipo I.

altamente localizados cerca de los bordes de la nanocinta pueden ser observados. Nótese que estos estados de borde son bandas planas que siempre unen dos puntos en los que las bandas se tocan a energías cero o $\pm\pi$ [es decir, unen pares de soluciones de la ecuación (92), que para el caso estudiado en esta sub sección son tipo I]. Como antes estos estados de borde unen dos TBP's con fase de Berry opuesta. Para mayores detalles acerca de esto ver el capítulo 7.

Soluciones tipo II

Ahora toca el turno de analizar los estados de borde que emergen de la presencia de soluciones tipo II. Para esto, primero se obtuvo la estructura de bandas de las cuasi energías por medio de

la diagonalización numérica del operador de evolución temporal Ec. (128) como función de k_x para un conjunto de parámetros dentro de las regiones II en el diagrama de fase topológico Fig. 38. En la Fig. 40 b) se muestra dicha estructura de bandas para $\sigma = 1/3$, $\phi = 0$, $\lambda = 1$, $\tau = 5,46$ y $N = 164$, obtenida usando condiciones de frontera fijas. Al igual que antes los colores en la figura representan el logaritmo de la razón de participación normalizada. En esta figura, además de un par de soluciones de tipo I hay otro par de soluciones de tipo II. Al igual que en el caso de soluciones tipo I en el que estado de borde uniendo dos pares de dichas soluciones emergen, en el caso de soluciones tipo II pasa algo similar. Esto es, aparece un estado de borde uniendo dos soluciones de tipo II. Sin embargo, hay algunas diferencias con el caso I. La principal diferencia es que en el caso de soluciones tipo II, los estados de borde no son bandas planas sino estados dispersivos que tienen una curvatura distinta de cero, es interesante que a medida que estos estados de borde se acercan al punto $k_x = 0$ su curvatura se vuelve más pronunciada y las funciones de onda de dichos estados comienzan a volverse extendidas, ver Fig. 40 b) en donde se presenta una ampliación del estado de borde que emerge debido a la presencia de soluciones tipo II. Observe como los estados de borde comienzan y terminan en soluciones de tipo II, esto sugiere que dichos estados pudieran tener una naturaleza topológica no trivial. para probar la validez de dicho enunciado no podemos proceder de la misma manera en la que probamos la naturaleza topológica de los estados de borde que aparecieron en el caso de soluciones tipo I pues las soluciones de tipo II no requieren que el conmutador ecuación (83) sea cero. Por lo tanto, para confirmar o negar las propiedades topológicas de este tipo de estados de borde, lo que haremos es analizar las propiedades topológicas de una rebana unidimensional del sistema, es decir, estudiaremos las propiedades topológicas de nuestro sistema para una k_x fija. Esto será hecho en una región del diagrama de fase que se encuentre dentro de la región II. Una vez que se considera que k_x es constante, las propiedades topológicas del sistema están dadas por el número de *winding* del vector unitario $\hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}$ que aparece en el Hamiltoniano efectivo (88) y que se define en la Ec. (91). Es bien sabido que un número de *winding* distinto de cero es una firma de propiedades topológicas no triviales. Ahora, si el vector unitario $\hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}$, para una k_x fija, tiene un número de *winding* distinto de cero se sigue que la rebana unidimensional del sistema, para ese valor dado de k_x , tiene propiedades topológicas no triviales, sin embargo, el sistema completo (es decir, el sistema bidimensional) no necesariamente es topológicamente no trivial pero puede ser topológicamente débil. En la Fig. 40 a) se muestra el *winding* del vector unitario $\hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}$ como una función de k_y obtenido de la expresión analítica Ec. (91) para $k_x = 0,9\pi/\sqrt{3}$, $\sigma = 1/3$, $\phi = 0$, $\tau = 5,46$ y $\lambda = 1$. En dicha figura puede verse claramente que el número de *winding* de esta rebana unidimensional del sistema (para $k_x = 0,9\pi/\sqrt{3}$) es distinto de cero, de hecho tiene un valor de 6, lo que implica que los estados de borde que aparecen cuando hay soluciones tipo II son, al menos, tienen una naturaleza topológica débil.

9. Conclusiones

En estos capítulos (capítulos 7 y 8) se estudió el caso de una nanocinta de grafeno con terminación zigzag sometida a deformaciones mecánicas dependientes del tiempo. Para el caso de deformaciones mecánicas uniaxiales (tanto para el caso de deformaciones dentro del plano como para deformaciones fuera del plano) y periódicas se pudo obtener el espectro de cuasienergías del sistema de manera analítica. Usando dicho resultado, se encontró que aparecen una especie de conos de Dirac a cuasienergías cero y $\pm\pi$ (es decir, puntos en los cuales los bordes de banda se tocan a cuasienergía cero o $\pm\pi$ siguiendo una dispersión lineal). Estas soluciones pueden ser de dos tipos, que denotamos como tipo I y tipo II. Para las soluciones de tipo I se encontró que, si se consideraba una nanocinta de grafeno finita con terminación zigzag, estas soluciones dan lugar a bandas planas cuyas eigenfunciones están altamente localizadas cerca de los bordes de la nanocinta. Estas bandas planas tienen un origen similar al de las bandas planas observadas en nanocintas de grafeno finitas con terminación zigzag sin deformar. En pocas palabras, las bandas planas unen dos soluciones tipo I con fase de Berry opuesta, este punto fue demostrado por medio de la evaluación directa de la fase de Berry en las cercanías de los TBPs tipo I. Por otro lado, se encontró que las soluciones tipo II también dan lugar a estados de borde, sin embargo, sólo logramos probar que dichos estados de borde son topológicamente débiles. Eso fue demostrado por medio del cálculo numérico del número de *winding* de una rebana unidimensional del Hamiltoniano efectivo del sistema, es decir, para un valor fijo del cuasi momento k_x . Además de lo anterior, fuimos capaces de construir el diagrama de fase topológico del sistema. Para finalizar, hacemos énfasis en que la realización experimental de nuestro modelo es muy difícil, sin embargo hay algunas propuestas para experimentos que son muy similares a nuestros modelos. Es posible inducir corrugaciones o deformaciones uniaxiales en grafeno por medio de su crecimiento sobre sustratos con una constante de red diferente a la del grafeno. Después, la modulación temporal puede ser llevada a cabo por medio de la aplicación periódica de un patrón de presión sobre el sistema completo, esto es, sobre el grafeno y el sustrato. Sin embargo el período de la modulación del campo de presiones debe ser del orden de femto segundos, dichos escalas de tiempo pueden ser logradas si se usan, por ejemplo, láseres de Titanio-Safiro para inducir las deformaciones. Otra alternativa es el uso de redes artificiales u ópticas en las que los parámetros de salto pueden ser controlados a voluntad a escalas de tiempo similares a las que fueron estudiadas aquí. Finalmente, sólo nos queda decir que para la observación de los estados de borde encontrados en los capítulos 7 y 8 no es realmente necesario utilizar pulsos ultra cortos (es decir, pulsos tipo función delta de Dirac), de hecho es suficiente con considerar el caso de modulación temporal periódica tipo sinusoidal. Desafortunadamente, al utilizar una modulación temporal tipo sinusoidal, la observación de los estados de borde se vuelve más complicada pues las brechas energéticas seculares se vuelven más pequeñas.

Nanocintas de grafeno con terminación armchair

En los capítulos 7 y 8 se ha estudiado como es que se afectan las propiedades electrónicas de nanocintas de grafeno con terminación zigzag cuando un campo de deformación dependiente del tiempo está presente. En particular, se analizó una deformación periódica en el tiempo y en el espacio. El principal resultado obtenido fue la aparición de bandas planas a cuasi energías cero y $\pm\pi$, las cuales están protegidas topológicamente. Esto fue probado por medio de la evaluación explícita de la fase de Berry, en las cercanías de los puntos en los cuales estas bandas planas emergen. Es importante mencionar que en dicho sistema se encontraron características topológicas no triviales a pesar de que el sistema se encontraba en una fase en donde no había brecha energética. Sin embargo, puede resultar muy interesante ver que le sucede a los estados de borde encontrados en el caso de una nanocinta de grafeno con terminación zigzag si estos se encuentran en una fase en la que el sistema tenga una brecha energética diferente de cero. Como se verá más adelante, es posible analizar la situación anterior si se considera el mismo tipo de deformación mecánica dependiente del tiempo pero ahora en el caso de nanocintas de grafeno con terminación armchair. El estudio de este caso será el objetivo del presente capítulo.

Para comenzar daremos una breve descripción de lo que es un aislante topológico, ya que dicha definición nos será útil a lo largo del presente capítulo. Los aislantes topológicos son materiales que pueden soportar excitaciones de baja energía a lo largo de los bordes del material, estas excitaciones de baja energía están protegidas topológicamente [119] y han atraído gran interés debido a sus potenciales aplicaciones en el campo de la computación cuántica topológica [120, 121] o en la espintrónica [122, 123, 124]. Más aún, después de la observación experimental de los aislantes topológicos [125, 126], muchos sistemas con características topológicas no triviales han sido propuestos [127, 128, 129, 101, 76, 130, 131, 132, 133, 134, 105, 135, 136, 137, 138, 139, 140, 141, 142]. Entre ellos, uno puede mencionar el notable caso de los sistemas periódicamente modulados en el tiempo, los cuales han mostrado tener un rico comportamiento topológico con características no presentes en el caso de aislantes topológicos sin dependencia temporal [143, 144, 129]. Por ejemplo, los sistemas modulados periódicamente en el tiempo pueden dar lugar a estados de borde con una naturaleza tipo fermiones de Majorana [96], estados chirales y contra

propagantes [76], entre muchos otros fenómenos interesantes [145, 146, 73, 89, 147]. La emergencia de estados de borde está protegida por una ley de conservación o una simetría del sistema en el bulto, este principio es conocido como la correspondencia borde-bulto [82]. El papel jugado por la simetría es fundamental para una correcta descripción de las propiedades topológicas del sistema en consideración, debido a que dicha simetría arroja luz acerca del invariante topológico necesario para describir las propiedades topológicas del sistema [148, 149]. Aunque se ha hecho un gran progreso en la clasificación topológica de sistemas periódicamente modulados que tienen una brecha energética distinta de cero [150, 151], la clasificación topológica de sistemas sin brecha energética está aún lejos de estar completa. Por ejemplo, las propiedades topológicas de semi metales de Dirac no pueden ser descritas por los invariantes usados para el caso de sistemas con brechas energéticas diferentes de cero [84].

Motivados por la discusión anterior, en este capítulo estudiamos la emergencia de estados de borde en una nanocinta de grafeno con terminación armchair sometida a un campo de deformación uniaxial que es periódico en el espacio y que además es encendido y apagado de manera periódica en el tiempo, para hacer esto usaremos la aproximación de amarre fuerte y trabajaremos en el marco de la teoría de Floquet. Antes de continuar con dicho estudio, es importante remarcar las diferencias entre este caso y el caso zigzag estudiado en los dos capítulos anteriores. El caso estudiado en este capítulo es esencialmente diferente al caso de nanocintas de grafeno con terminación zigzag. La primera y, tal vez, la más importante diferencia es que el caso armchair es capaz de soportar fases en las que hay brecha energética y fases en las que la brecha energética es de tamaño cero, mientras que el caso zigzag únicamente es capaz de dar lugar a fases con brecha energética de tamaño cero. Esto es una consecuencia directa de las propiedades estáticas de una nanocinta de grafeno con terminación armchair [20, 152, 59, 153] (ver capítulo 4). La segunda diferencia tiene que ver con las características de los estados de borde observados para el caso armchair. Pues la naturaleza de los estados de borde observados en el caso armchair es fundamentalmente diferente a la de los estados de borde obtenidos en el caso zigzag. Por ejemplo, como se verá más adelante, el caso armchair en la fase con brecha energética de tamaño cero uno puede observar estados de borde tipo coseno que, además, se mezclan y coexisten con las bandas del bulto. Por otro lado, en la fase con brecha energética diferente de cero a cuasi energía cero uno observa la emergencia de estados de borde a dicha cuasi energía; adicionalmente, en otros lugares en los que se abren brechas energéticas seculares aparecen estados de borde diferentes. Este hecho es interesante pues se ha probado que para sistemas periódicamente modulados en el tiempo con simetría chiral y brechas energéticas diferentes de cero a cuasi energías cero o $\pm\pi$, dichas brechas energéticas son topológicamente triviales desde el punto de vista del número de Chern [154]. Las consecuencias del enunciado anterior son discutidas a lo largo del presente capítulo. Para finalizar, es importante hacer algunos comentarios acerca de la posible realización experimental de nuestro modelo. Sin embargo, como esto ya ha sido discutido antes, remitimos al lector al capítulo 7 para mayores detalles acerca de la posible realización experimental de nuestro

modelo.

10. Deformaciones dentro del plano

Como antes consideraremos una deformación uniaxial dentro del plano aplicada a una nanocinta de grafeno con terminación armchair. La deformación considerada es periódica en el espacio y tiene la siguiente forma,

$$u(y_j) = \lambda \cos(2\pi\sigma y_j + \phi).$$

Dado que ya hemos estudiado el caso de modulación temporal tipo coseno en el capítulo 7 y dado que este tipo de modulación no modifica de manera significativa los resultados obtenidos al considerar una modulación temporal tipo función delta de Dirac, en este capítulo únicamente consideraremos el caso de una modulación temporal en el límite de pulsos ultra rápidos, es decir, consideraremos el caso de una modulación temporal tipo función delta de Dirac. Para este caso y para un campo de deformación como el definido arriba, el Hamiltoniano dependiente del tiempo, que será estudiado en lo que sigue, toma la siguiente forma,

$$H(k_x, t) = H_0(k_x) + \sum_m [H_1(k_x) - H_0(k_x)] \delta(t/T - m), \quad (125)$$

con los Hamiltonianos H_0 y H_1 dados por las siguientes relaciones,

$$\begin{aligned} H_0(k_x) &= \sum_{j=1}^{N/2-1} \gamma_0 \left[d(k_x) a_{2j}^\dagger b_{2j} + a_{2j-1}^\dagger b_{2j-1} \right] \\ &+ \sum_{j=1}^{N/2-1} \gamma_0 a_j^\dagger b_{j+1} + \text{h.c.}, \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} H_1(k_x) &= \sum_{j=1}^{N/2-1} \gamma_0 \left[d(k_x) a_{2j}^\dagger b_{2j} + a_{2j-1}^\dagger b_{2j-1} \right] \\ &+ \sum_{j=1}^{N/2-1} \gamma_j a_j^\dagger b_{j+1} + \text{h.c.} \end{aligned}$$

donde $\beta \approx 3,37$ es la razón de decaimiento [38, 40] (parámetro de Grüneisen). El parámetro $\gamma_0 = 2,7 \text{ eV}$ es el parámetro de salto inter atómico en grafeno sin deformar y será tomado como $\gamma_0 = 1$ en lo que sigue, en otras palabras, mediremos las energías en términos de γ_0 . Los parámetros de salto, γ_j , están dados por,

$$\frac{\gamma_j}{\gamma_0} = \exp \left[\beta \left(\sqrt{1 - \lambda \sqrt{3} f(j, \sigma, \phi) + \lambda^2 f^2(j, \sigma, \phi)} - 1 \right) \right], \quad (126)$$

Para finalizar, las función $f(j, \sigma, \phi)$ se define como,

$$f(j, \sigma, \phi) = 2 \sin\left(\sqrt{3}\pi\sigma/2\right) \sin\left[\sqrt{3}\pi\sigma(j + 1/2) + \phi\right]. \quad (127)$$

Las principales características del Hamiltoniano $H_1(k_x)$ ya han sido estudiadas en detalle en el capítulo 4 en el límite de amplitudes pequeñas del campo de deformación. Sin embargo es conveniente hacer algunos comentarios acerca de las diferencias de la contraparte del Hamiltoniano $H_1(k_x)$ en el caso zigzag. En general, es mucho más fácil abrir una brecha energética en el espectro de energía de una nanocinta de grafeno con terminación armchair por medio de la aplicación de deformaciones mecánicas a lo largo de la dirección zigzag de dicha nanocinta que aplicando deformación a lo largo de la dirección armchair en una nanocinta de grafeno con terminación zigzag [20] (ver el capítulo 4). Por lo tanto, se espera que, en el caso de una nanocinta de grafeno con terminación armchair, se abran más brechas energéticas para ciertos valores de los parámetros del campo de deformación en comparación con el caso de nanocintas de grafeno con terminación zigzag. De hecho, este será el caso como se verá más adelante.

Al igual que antes, estudiaremos las propiedades del Hamiltoniano (125) usando el operador de evolución temporal de un período que se define como,

$$\begin{aligned} U(k_x, \tau) &= \mathcal{T} \exp\left[-i \int_0^\tau H(k_x, t) dt/\hbar\right] \\ &= \exp[-i\tau(H_1(k_x) - H_0(k_x))] \exp[-i\tau H_0(k_x)], \end{aligned} \quad (128)$$

El espectro de energía de dicho operador será estudiado por medio de un Hamiltoniano efectivo definido como,

$$U(k_x, \tau) = \exp[-i\tau H_{\text{eff}}(k_x, \tau)].$$

De tal suerte que los eigenvalores del operador de evolución temporal de un período está dados por los eigenvalores de $\tau H_{\text{eff}}(k_x, \tau)$, dichos eigenvalores serán denotados por $\tau\omega(k_x, \tau)$, las llamadas cuasi energías del sistema.

A pesar de que nuestro modelo puede ser estudiado dentro de un rango muy amplio de los valores de sus parámetros nos centraremos en dos valores particulares de la frecuencia del campo de deformación (σ). Los valores elegidos son los siguientes: 1) $\sigma = 1/\sqrt{3}$ y 2) $\sigma = 0,5/\sqrt{3}$ con $\phi = \pi\sigma$ para ambos casos. La elección de los valores anteriores de σ se debe a que el valor $\sigma = 1/\sqrt{3}$ da el período espacial más pequeño del sistema a lo largo del eje y y el sistema se encuentra en una fase en la que no hay brecha energética alrededor del cero de la cuasi energía ni alrededor de las cuasi energías $\pm\pi$. Por otro lado, para $\sigma = 0,5/\sqrt{3}$ se obtiene el segundo valor más pequeño del período espacial del sistema y el sistema se encuentra en una fase en la que hay una brecha energética distinta de cero alrededor del cero de la cuasi energía en el espectro energético del bulto.

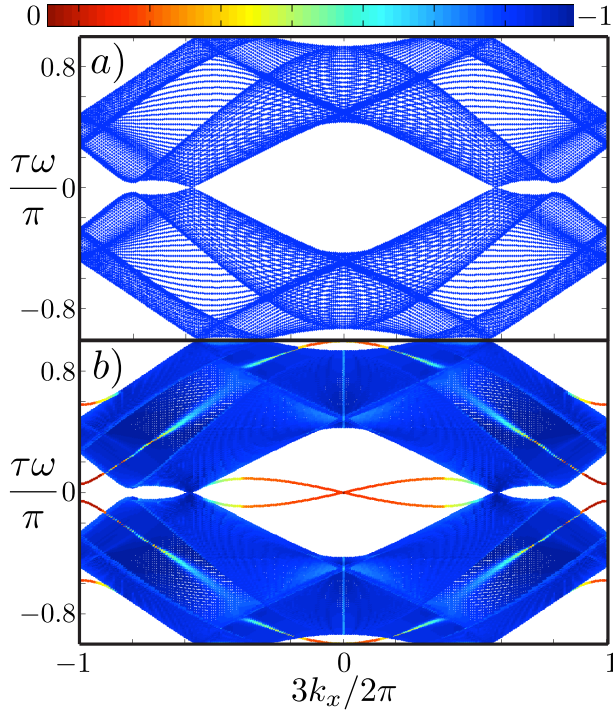


Figura 41: Estructura de bandas de las cuasi energías para una fase en la que no hay brecha energética obtenida por medio de la diagonalización de la representación matricial de la Ec. (128). Los parámetros usados son $\sigma = 1/\sqrt{3}$, $\lambda = 0,2$, $\tau = \pi$, $\phi = \pi\sigma$ y $N = 324$ para a) condiciones de frontera cíclicas y b) condiciones de frontera fijas. En el panel a) no se observan estados de borde debido a que se usaron condiciones de frontera cíclicas. En el panel b), en cambio, se observan dos tipos de estados de borde. Unos aparecen alrededor del cero de la cuasi energía. Los otros son estados de borde que tienen una dispersión tipo coseno, estos estados se mezclan y coexisten con los estados del bulto. Los colores representan el NPR, el cual es definido en la Ec. (26). El color rojo corresponde a estados altamente localizados, mientras que el color azul corresponde a estados totalmente extendidos.

Para $\sigma = 1/\sqrt{3}$ la super celda de la nanocinta de grafeno contiene dos filas de átomos de carbono en la dirección y , en otras palabras, hay cuatro átomos diferentes en la super celda. Esto se debe a que los parámetros de salto únicamente toman dos valores diferentes, los cuales pueden ser obtenidos al sustituir la siguiente expresión

$$f(j, 1/\sqrt{3}, \phi) = 2\lambda(-1)^j \cos(\phi), \quad (129)$$

en la Ec. (126). Para $\sigma = 0,5/\sqrt{3}$ los parámetros de salto toman cuatro valores diferentes, lo que significa que la super celda tiene ocho átomos distintos. De nueva cuenta, los parámetros de salto pueden ser obtenidos al sustituir la siguiente expresión

$$f\left(j, \frac{1}{2\sqrt{3}}, \phi\right) = 2\lambda \sin\left[\frac{\pi}{2}(j+1/2)\right] \sin\left[\frac{\pi}{4} + (-1)^j \phi\right], \quad (130)$$

en la Ec. (126).

10.1. Espectro de cuasi energías

En esta sección se estudiará el espectro de cuasi energías y la emergencia de estados de borde con propiedades topológicas no triviales. Para esto se construirá la representación matricial del

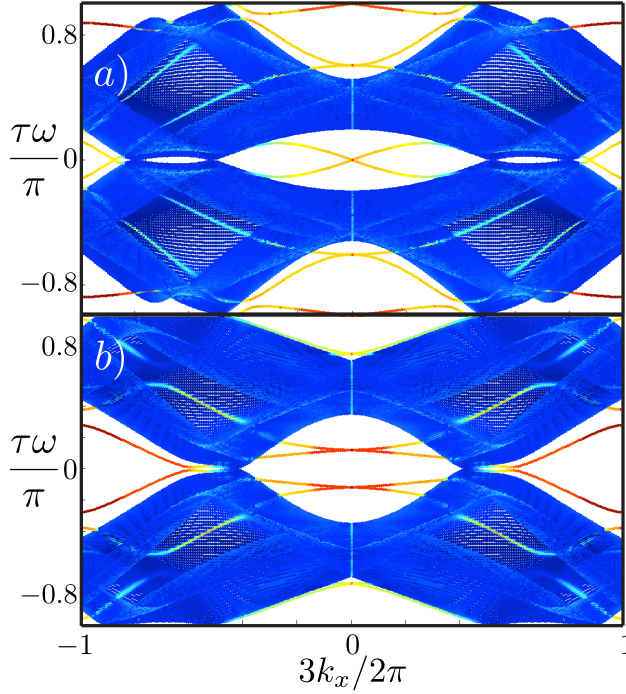


Figura 42: Estructura de bandas de las quasi energías obtenido por medio de la diagonalización numérica de la representación matricial de la Ec. (128). Los parámetros usados son $\sigma = 1/\sqrt{3}$, $\lambda = 0,2$, $\tau = \pi$, $N = 324$ y, además, se usaron condiciones de frontera fijas para a) $\phi = 0$ y b) $\phi = \pi\sigma/2$. Nótese que en los paneles a) y b) se observan estados de borde que penetran profundamente en las bandas del bulto sin perder del todo su localización. Además, en el panel b), los estados de borde que aparecen alrededor del cero de la quasi energía están desacoplados. Se ha usado el mismo código de color que el usado en la Fig. 41 para mostrar la localización de cada función de onda.

operador de evolución temporal de un período $U(k_x, \tau)$. Después, se obtendrán sus eigenvalores como función de k_x por medio de cálculos numéricos para una nanocinta de tamaño finito. En todos los casos considerados de aquí en adelante se ha considerado que la celda unitaria de la nanocinta tiene $N = 324$ átomos. Es importante notar que para $\sigma = 1/\sqrt{3}$ o $\sigma = 0,5/\sqrt{3}$ el sistema no es periódico únicamente a lo largo de la dirección x sino también a lo largo de la dirección y . Por lo tanto, al aplicar condiciones de frontera periódicas a lo largo de la dirección x y a lo largo de la dirección y el espectro de quasi energías también puede ser obtenido por medio de una transformación de Fourier de los Hamiltonianos $H_0(k_x)$ y $H_1(k_x)$. Sin embargo, si se sigue este método no somos capaces de observar los estados de borde que emergerían para un sistema finito, por otro lado, este método nos permite comparar resultados numéricos con resultados analíticos para comprobar la veracidad de ambos resultados. Para observar los estados de borde realizaremos cálculos numéricos en el espacio real.

Comenzaremos por estudiar la fase en la que el sistema no tiene brecha energética, es decir, estudiaremos el caso en el que $\sigma = 1/\sqrt{3}$. La estructura de bandas para este caso se muestra en la Fig. 41, en donde, para la realización de la gráfica, se han usado los siguientes valores $\lambda = 0,2$, $\tau = \pi$, $\phi = \pi\sigma$ y $\sigma = 1/\sqrt{3}$. En el panel a) hemos usado condiciones de frontera cíclicas, mientras que en el panel b) hemos usado condiciones de frontera fijas. Observe que la única diferencia entre el panel a) y el panel b) es que en el último panel estados de borde emergen. Los colores en

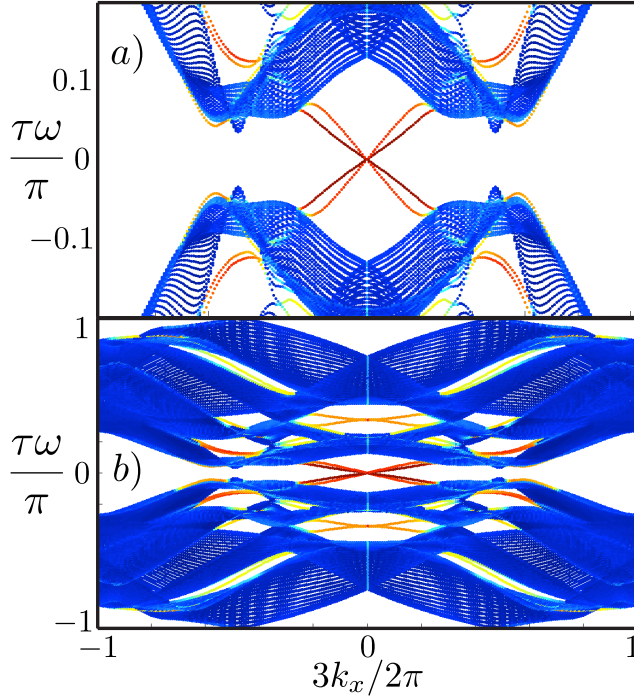


Figura 43: Estructura de bandas de las quasi energías para una fase en la que el sistema tiene una brecha energética alrededor del cero de la quasi energía. Dicha estructura de bandas fue obtenida por medio de la diagonalización numérica de la representación matricial de la Ec. 128 para $\sigma = 1/2\sqrt{3}$, $\lambda = 0,2$, $\tau = \pi$, $\phi = \pi\sigma$, $N = 324$ y, además, se usaron condiciones de frontera fijas. En el panel a) mostramos una ampliación alrededor del cero de la quasi energía para una mejor visualización de los estados de borde que aparecen alrededor de la quasi energía cero y que cierran la brecha energética. Observe que cada vez que una brecha energética secular aparece también aparecen estados de borde. Se usó el mismo código de color que el usado en la Fig. 41 para mostrar la localización de las funciones de onda.

la figura, al igual que antes, representan el logaritmo de la razón de participación normalizada, NPR . Un hecho interesante a ser notado es que, a pesar de que el sistema se encuentra en una fase en la que el sistema no tiene brecha energética, es posible observar estados de borde (los cuales están altamente localizados cerca de los bordes de la nanocinta). Más aún, uno puede observar dos tipos de estados de borde en la Fig. 41. Unos se encuentran alrededor de la quasi energía cero, estos estados están degenerados en $k_x = 0$. Sin embargo, conforme uno se aleja del punto $k_x = 0$ dichos estados comienzan a desacoplarse y a volverse estados extendidos. El otro tipo de estados de borde tienen una dispersión tipo coseno y también están degenerados en $k_x = 0$ a quasi energías $\pm\pi$. Conforme uno se aleja de $k_x = 0$ estos estados comienzan a desacoplarse y, eventualmente, ellos se fusionan con las bandas del bulto sin convertirse en estados completamente extendidos. Estos estados se encuentran localizados en bordes opuestos de la nanocinta, este hecho fue comprobado numéricamente. Adicionalmente, queremos llamar la atención acerca de la fuerte dependencia de la forma del espectro de quasi energía sobre la fase del campo de deformación, ϕ . Para comprobar la aseveración anterior en la Fig. 42 se muestran la estructura de bandas del sistema para: $\phi = 0$ [panel a)] y $\phi = \pi\sigma/2$ [panel b)], en ambos paneles se han usado los mismo parámetros usados en la Fig. 41 y fueron obtenidos usando condiciones de frontera fijas. En el panel a) de la Fig. 42 puede verse que los estados de borde son muy similares a lo observados en la Fig. 41 b). Por otro lado, observe que los estados de borde en la Fig. 42 b) no se tocan cuando

$k_x = 0$, en lugar de eso, una brecha energética secular se abre entre ellos, además, dichos estados se desacoplan en cuatro bandas. Finalmente, nótese que los estados de borde observados en la Fig. 42 a) penetran profundamente en las bandas del bulto manteniéndose localizados cerca de los bordes de la nanocinta.

La fuerte dependencia de la espectro de cuasi energías en la fase del campo de deformación, ϕ , puede ser entendida como sigue. Básicamente, la fase del campo de deformación como es que el patrón de deformación se ajusta a los bordes de la nanocinta de grafeno. Se ha demostrado que la forma en la que el ajuste entre la deformación y la nanocinta es un factor crucial en la determinación de las propiedades topológicas de esta clase de sistemas. Cambiando de tema, por razones de espacio, en lo que sigue únicamente nos enfocaremos en estudiar los estados de borde que aparecen para el caso en el que $\phi = \pi\sigma$. Para los otros casos se obtienen esencialmente los mismos resultados.

Para terminara, analizaremos el espectro de cuasi energías para una fase en la que el sistema tiene una brecha energética distinta de cero alrededor de la cuasi energía cero. Dado que los estados de borde topológicos son muy robustos ante perturbaciones, esperamos que los estados de borde vistos en la Fig. 41 b) no sean destruidos por una brecha energética distinta de cero. Tal aseveración es confirmada en la Fig. 43 en donde se ha graficado la estructura de bandas de las cuasi energías para una fase del sistema en la que hay una brecha energética de tamaño distinto de cero. Se han usado las mismas condiciones que se usaron en la Fig. 43 pero con $\sigma = 0,5/\sqrt{3}$ y usando condiciones de frontera fijas. En dicha figura puede observarse que cuatro estados de borde aparecen alrededor del cero de la cuasi energía, además nótese que dichos estados cierran la brecha energética. Obsérvese, además, que los estados de borde convergen en un único punto, $k_x = 0$, el cual es un punto simétrico ante reversión temporal. Adicionalmente, uno puede observar la emergencia de estados de borde cada vez que e abre una brecha energética secular a cuasi energías distintas de cero o $\pm\pi$. Cambiando de tema, más adelante veremos que nuestro modelo posee simetría chiral, lo que implica que los estados de borde que aparecen en la brecha energética alrededor del cero de la cuasi energía son topológicamente triviales desde el punto de vista del número de Chern, sin embargo, esto no excluye la posibilidad de que tales estados puedan tener una naturaleza topológica débil. Por otro lado, los estados de borde que aparecen en otras brechas energéticas que no estén centradas alrededor de cuasi energía cero o $\pm\pi$ pueden ser topológicos, esto aplica para los estados que aparecen en las brechas energéticas seculares del panel b) de la Fig. 43.

10.2. Propiedades topológicas de los estados de borde

Antes de comenzar con el análisis de las propiedades topológicas de los estados de borde encontrados en la sección anterior, es conveniente escribir la transformada de Fourier de los Hamiltonianos $H_1(k_x)$ y $H_0(k_x)$ para en el caso en el que se consideran condiciones de frontera

cíclicas a lo largo de la dirección y . Para ese caso es posible escribir los Hamiltonianos $H_1(k_x)$ y $H_0(k_x)$ completamente en el espacio recíproco de nuestro sistema tomando en cuenta la periodicidad a lo largo de la dirección y , que surge para los casos en que $\sigma = 1/\sqrt{3}$ o $\sigma = 0,5/\sqrt{3}$. Si ese es el caso, resulta que k_y es un buen número cuántico, de ahí se sigue que los Hamiltonianos $H_1(k_x)$ y $H_0(k_x)$ se reducen a matrices de tamaño $4Q \times 4Q$ que dependen de $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, en donde Q es el número de filas distintas a lo largo de la dirección y . De hecho Q está relacionada con la frecuencia de la deformación de la siguiente manera $\sigma = P/(\sqrt{3}Q)$. Dicha relación se debe al hecho de que la componente y de las posiciones de los átomos a lo largo de la celda unitaria de una nanocinta de grafeno con terminación armchair está dada por múltiplos enteros de $\sqrt{3}a_c/2$. Para $\sigma = 1/\sqrt{3}$, las matrices toman su menor tamaño pues $Q = 1$, por lo tanto los Hamiltonianos $H_1(\mathbf{k})$ y $H_0(\mathbf{k})$ pueden ser escritos en el espacio recíproco como matrices de tamaño 4×4 . El caso $Q = 1$ es el más simple posible y será el único que se estudiará de manera analítica, esto será realizado en la siguiente sección debido a las implicaciones que tiene sobre las propiedades topológicas del sistema en la fase sin brecha energética.

Uno puede simplificar más los Hamiltonianos $H_1(\mathbf{k})$ y $H_0(\mathbf{k})$ para alguna Q en general si dichos Hamiltonianos se escriben en la base chiral (la base chiral es una base tal que todas las funciones de onda de los sitios A aparecen como las primeras entradas del eigenvector del sistema, mientras que las funciones de onda de los sitios B son las segundas entradas del tal eigenvector). Usando la base chiral uno obtiene que,

$$\mathbb{H}_l(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} 0 & \tilde{\mathbb{H}}_l(\mathbf{k}) \\ \tilde{\mathbb{H}}_l^\dagger(\mathbf{k}) & 0 \end{bmatrix}, \quad (131)$$

donde $l = 0, 1$ y la tilde indica que las matrices son de tamaño 2×2 . La forma explícita de las matrices $\tilde{\mathbb{H}}_l(\mathbf{k})$, para el caso de $\sigma = 1/\sqrt{3}$, es la siguiente,

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbb{H}}_0(\mathbf{k}) &= \begin{bmatrix} 1 & 1 + e^{-i\sqrt{3}k_y} \\ 1 + e^{i\sqrt{3}k_y} & e^{-i3k_x} \end{bmatrix}, \\ \tilde{\mathbb{H}}_1(\mathbf{k}) &= \begin{bmatrix} 1 & \gamma_1 + \gamma_2 e^{-i\sqrt{3}k_y} \\ \gamma_1 + \gamma_2 e^{i\sqrt{3}k_y} & e^{-i3k_x} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (132)$$

Así, el Hamiltoniano que perturba a H_0 se define como $\delta\mathbb{H} = \mathbb{H}_1(\mathbf{k}) - \mathbb{H}_0(\mathbf{k})$ y toma la siguiente forma,

$$\delta\mathbb{H}(k_y) = \begin{bmatrix} 0 & \delta\tilde{\mathbb{H}}(k_y) \\ \delta\tilde{\mathbb{H}}(k_y) & 0 \end{bmatrix}, \quad (133)$$

con

$$\delta\tilde{\mathbb{H}}(k_y) = \begin{bmatrix} 0 & \delta_1 + \delta_2 e^{-i\sqrt{3}k_y} \\ \delta_1 + \delta_2 e^{i\sqrt{3}k_y} & 0 \end{bmatrix}, \quad (134)$$

donde $\delta_{1,2} = \gamma_{1,2} - 1$. Nótese como la dependencia en k_x se ha cancelado debido a que el Hamiltoniano $H_1(\mathbf{k})$ y el Hamiltoniano $H_0(\mathbf{k})$ tienen la misma simetría en la dirección k_x .

Para estudiar las propiedades topológicas de nuestro modelo iniciamos buscando las simetrías de los Hamiltonianos $H_1(\mathbf{k})$ y $H_0(\mathbf{k})$. Nótese que tales Hamiltonianos cumplen la siguiente condición,

$$\Gamma \mathbb{H}_l(\mathbf{k}) \Gamma = -\mathbb{H}_l(\mathbf{k}) \quad (135)$$

donde $l = 0, 1$ y Γ es el operador chiral. Γ es un operador unitario que puede ser representado, en la base chiral, como,

$$\Gamma = \begin{bmatrix} \mathbb{I}_{2Q \times 2Q} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I}_{2Q \times 2Q} \end{bmatrix}, \quad (136)$$

dada la unitariedad del operador Γ , tenemos que, $\Gamma^2 = \mathbb{I}_{4Q \times 4Q}$. Como una consecuencia de la Ec. (135), la transformada de Fourier del Hamiltoniano dependiente del tiempo Ec. (125) posee la siguiente propiedad,

$$\Gamma \mathbb{H}(\mathbf{k}, t) \Gamma = -\mathbb{H}(\mathbf{k}, -t) \quad (137)$$

De la ecuación (137) se sigue que el Hamiltoniano dependiente del tiempo (125) es chiral. De esto resulta que la transformada de Fourier del operador de evolución temporal de un período debe de cumplir la siguiente condición,

$$\Gamma \mathbb{U}(\mathbf{k}, \tau) \Gamma = \mathbb{U}^{-1}(\mathbf{k}, \tau) = \mathbb{U}^\dagger(\mathbf{k}, \tau) = \mathbb{U}(\mathbf{k}, -\tau), \quad (138)$$

donde la transformada de Fourier del operador de evolución temporal de un período ahora está dado por la siguiente relación,

$$\mathbb{U}(\mathbf{k}, \tau) = e^{-i\tau\delta\mathbb{H}(\mathbf{k})} e^{-i\tau\mathbb{H}_0(\mathbf{k})}. \quad (139)$$

Nótese que usando la Ec. (138), el operador $\mathbb{U}(-\tau)$ puede escribirse como,

$$\mathbb{U}(\mathbf{k}, -\tau) = e^{i\tau\mathbb{H}_0(\mathbf{k})} e^{i\tau\delta\mathbb{H}(\mathbf{k})}. \quad (140)$$

que es el mismo resultado que uno obtiene directamente del uso del operador de ordenamiento temporal que aparece en la definición del operador de evolución temporal de un período.

Debido a la condición impuesta por la Ec. (138), el espectro de cuasi energías debe ser simétrico alrededor del cero de la cuasi energía, sentencia que es confirmada en las Figs. 41, 42 y 43. Adicionalmente la restricción Ec. 138 para sistemas con brechas energéticas distintas de cero a cuasi energías cero o $\pm\pi$ impone la anulación del invariante topológico en dichas brechas energéticas, aunque brechas energéticas a otras cuasi energías pueden ser topológicamente no triviales. Lo anterior aplica desde el punto de vista del número de Chern. Es importante aclarar que a pesar de que el enunciado anterior nos da información acerca de la naturaleza topológica

de los estados de borde observados en la fase en la que el sistema tiene una brecha energética distinta de cero alrededor del cero de la cuasi energía, dicho enunciado no aporta ninguna información acerca de la topología de los estados de borde observados en la fase en la que el sistema no tiene brecha energética, de hecho, la naturaleza topológica de estos estados no está clara. Por lo tanto, la caracterización topológica de dichos estados será realizada en la siguiente sección, en donde se estudiarán las propiedades topológicas de una rebana unidimensional del sistema, en otras palabras, estudiaremos las propiedades topológicas de nuestro sistema para un k_x fija, en particular estudiaremos el caso en el que $k_x = 0$.

Para finalizar, estudiaremos las propiedades topológicas de los estados de borde observados en la fase en la que nuestro sistema tiene una brecha energética distinta de cero alrededor del cero de la cuasi energía. Como se mencionó anteriormente, para el caso $\sigma = 0,5/\sqrt{3}$, el invariante topológico para la brecha energética central es cero, a pesar de este hecho, observamos que estados de borde emergen y, de hecho, cierran esta brecha energética, ver Fig. 43. Esto implica que se necesita un invariante topológico nuevo para la caracterización del sistema o que los estados de borde observados en la Fig. 43 alrededor del cero de la cuasi energía son topológicamente débiles. Es interesante notar que dichos estados siguen una relación de dispersión lineal a bajas energías y además tales estados de borde se cruzan en un punto que es simétrico ante inversión temporal ($k_x = 0$). Es un hecho bien conocido que tal cruce es exigido por la simetría ante reversión temporal y que es una de las firmas de los aislantes topológicos, dicho de otra manera, los estados de borde que aparecen alrededor del cero de la cuasi energía en la Fig. 43 parecen tener una naturaleza topológica no trivial. Empero, estamos conscientes de que para determinar de manera completa y sin ambigüedades la naturaleza topológica de dichos estados es necesario calcular el invariante topológico del sistema. Sin embargo, debido a que tal invariante no está bien definido para el caso de sistemas periódicamente modulados en el tiempo y dado que dicho cálculo va más allá del propósito de la presente tesis, no lo calcularemos. Aunque esperamos que nuestro trabajo motive más investigaciones alrededor de este punto.

10.3. Estudio analítico de la topología para $\sigma = 1/\sqrt{3}$ en $k_x = 0$

En esta sección empezaremos por estudiar la emergencia de estados de borde para el caso en el que $\sigma = 1/\sqrt{3}$. Para hacer esto, nótese que los estados de borde emergerán por primera vez cuando los bordes inferior y superior del espectro de las cuasi energías se crucen por vez primera conforme uno aumenta τ . Esto puede ser visto en la Fig. 44. Los bordes de banda corresponden a valores extremos de la espectro de cuasi energías de la transformada de Fourier del operador de evolución temporal de un período definido en la Ec. (139). Es fácil mostrar que los valores máximos y mínimos del espectro de cuasi energías están dados por los puntos en los cuales los

Hamiltonianos \mathbb{H}_0 y $\delta\mathbb{H}$ conmutan. El conmutador de dichos Hamiltonianos está dado por,

$$[\delta\mathbb{H}(k_y), \mathbb{H}_0(\mathbf{k})] = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbb{C}}(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & \tilde{\mathbb{C}}(\mathbf{k}) \end{bmatrix}, \quad (141)$$

con

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbb{C}}(\mathbf{k}) = & 2i(\gamma_1 - \gamma_2) \sin(\sqrt{3}k_y)\sigma_z + 2 \left[\delta_1 \sin\left(\frac{3k_x}{2}\right) + \delta_2 \sin\left(\frac{3k_x}{2} - \sqrt{3}k_y\right) \right] \sin\left(\frac{3k_x}{2}\right)\sigma_x \\ & + 2 \left[\delta_1 \cos\left(\frac{3k_x}{2}\right) + \delta_2 \cos\left(\frac{3k_x}{2} - \sqrt{3}k_y\right) \right] \sin\left(\frac{3k_x}{2}\right)\sigma_y \end{aligned} \quad (142)$$

donde $\sigma_{x,y}$ son las matrices de Pauli y $\delta_{1,2} = \gamma_{1,2} - 1$ como antes.

Denotemos por k_x^* y k_y^* los puntos en los cuales el conmutador Ec. (141) es cero. De las ecuaciones (141) y (142) es fácil ver que $k_x^* = 3n\pi/2$ y $k_y^* = n\pi/\sqrt{3}$, donde n es un número entero. Dado que sólo estamos interesados en una rebanada unidimensional de nuestro sistema, primeramente consideraremos el caso en el que $k_x = 0$ y después estudiaremos el espectro de cuasi energías como una función de k_y .

Lo primero que debemos hacer es obtener el operador de evolución temporal de un período, por fines de claridad haremos esto para cualquier valor de k_x y después particularizaremos al caso $k_x = 0$, una vez lo anterior haya sido hecho procederemos a estudiar las propiedades topológicas de la rebanada unidimensional de nuestro sistema. Dicho lo anterior, para obtener el operador de evolución temporal de un período iniciamos por encontrar los eigenvalores y los eigenvectores del Hamiltoniano de una nanocinta de grafeno con terminación armchair sin deformar, es decir, obtendremos los eigenvalores y eigenvectores de $\mathbb{H}_0(\mathbf{k})$. Uno puede obtener los eigenvalores de $\mathbb{H}_0(\mathbf{k})$ de una manera muy sencilla por medio de la renormalización de una de las sub redes bipartitas de la red del grafeno, de hecho, este método equivale a encontrar los eigenvalores del cuadrado del Hamiltoniano $\mathbb{H}_0(\mathbf{k})$. Así, los eigenvalores del Hamiltoniano $\mathbb{H}_0(\mathbf{k})$, denotados por $E_{1,2}(\mathbf{b})$, están dados por,

$$\begin{aligned} E_1(\mathbf{k}) &= \pm \sqrt{3 + 4 \cos(3k_x/2) \cos(\sqrt{3}k_y/2) + 2 \cos(\sqrt{3}k_y)}, \\ E_2(\mathbf{k}) &= \pm \sqrt{3 - 4 \cos(3k_x/2) \cos(\sqrt{3}k_y/2) + 2 \cos(\sqrt{3}k_y)}. \end{aligned} \quad (143)$$

Para encontrar los eigenvectores de $\mathbb{H}_0(\mathbf{k})$ debemos encontrar una transformación unitaria que diagonalice a $\mathbb{H}_0(\mathbf{k})$. Si usamos el teorema de Bloch y la bien conocida solución para los eigenvectores de grafeno puro, uno obtiene la siguiente transformación unitaria que diagonaliza $\mathbb{H}_0(\mathbf{k})$,

$$O(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbb{M}}_a(\mathbf{k}) & \tilde{\mathbb{M}}_a(\mathbf{k}) \\ \tilde{\mathbb{M}}_b(\mathbf{k}) & -\tilde{\mathbb{M}}_b(\mathbf{k}) \end{bmatrix} \quad (144)$$

donde se han ordenado las energías de la siguiente manera E_1 , E_2 , $-E_1$, $-E_2$ y las matrices $\tilde{\mathbb{M}}_a(\mathbf{k})$ y $\tilde{\mathbb{M}}_b(\mathbf{k})$ están dadas por las siguientes expresiones,

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbb{M}}_a(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} & -e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} \end{bmatrix} \\ \tilde{\mathbb{M}}_b(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} e^{i\theta_1(\mathbf{k})} & e^{i\theta_2(\mathbf{k})} \\ e^{i\theta_1(\mathbf{k})}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} & -e^{i\theta_2(\mathbf{k})}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} \end{bmatrix},\end{aligned}\quad (145)$$

$\mathbf{a}_1 = (3, \sqrt{3})/2$, $\mathbf{a}_2 = (3, -\sqrt{3})/2$ son los vectores de red de grafeno puro y

$$\begin{aligned}e^{i\theta_1(\mathbf{k})} &= \frac{1}{E_1} \left[1 + 2e^{-3ik_x/2} \cos(\sqrt{3}k_y/2) \right] \\ e^{i\theta_2(\mathbf{k})} &= \frac{1}{E_2} \left[1 - 2e^{-3ik_x/2} \cos(\sqrt{3}k_y/2) \right].\end{aligned}\quad (146)$$

Ya que hemos encontrado los eigenvalores y los eigenvectores del Hamiltoniano $\mathbb{H}_0(\mathbf{k})$, el siguiente paso es transformar la ecuación (139) a la base en la que el Hamiltoniano $\mathbb{H}_0(\mathbf{k})$ es diagonal, en otras palabras, tenemos que calcular la matriz dada por $\mathbb{O}^\dagger \mathbb{U}(\mathbf{k}, \tau) \mathbb{O} = \mathbb{U}'(\mathbf{k}, \tau)$. Antes de calcular la matriz anterior, reduciremos $\mathbb{U}(\mathbf{k}, \tau)$ a una forma más sencilla para facilitar los cálculos. Para hacer lo anterior note que $(\delta\mathbb{H})^2 = (\delta E(k_y))^2 \mathbb{I}_{4\times 4}$, donde

$$\delta E(k_y) = \sqrt{(\gamma_1 - 1)^2 + (\gamma_2 - 1)^2 + 2(\gamma_1 - 1)(\gamma_2 - 1) \cos(\sqrt{3}k_y)}. \quad (147)$$

Una consecuencia directa de la propiedad anterior del Hamiltoniano $\delta\mathbb{H}$ es que la exponencial de dicho Hamiltoniano puede ser escrita como,

$$\exp[-i\tau(\delta\mathbb{H})] = \cos[\tau\delta E(k_y)]\mathbb{I}_{4\times 4} - i(\delta\mathbb{H}) \frac{\sin[\tau\delta E(k_y)]}{\delta E(k_y)}, \quad (148)$$

de la ecuación anterior se sigue que el operador de evolución temporal de un período, $\mathbb{U}(\mathbf{k}, \tau)$, puede ser escrito como,

$$\mathbb{U}(\mathbf{k}, \tau) = \left(\cos[\tau\delta E(k_y)] - i \frac{\sin[\tau\delta E(k_y)]}{\delta E(k_y)} \delta\mathbb{H}(k_y) \right) e^{-i\tau\mathbb{H}_0(\mathbf{k})}. \quad (149)$$

Ahora corresponde calcular la siguiente matriz $\delta\mathbb{H}'(k_y) = \mathbb{O}^\dagger \delta\mathbb{H}(k_y) \mathbb{O}$, después de algunas manipulaciones algebraicas uno encuentra lo siguiente,

$$\delta\mathbb{H}'(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} \delta\tilde{\mathbb{H}}_+(\mathbf{k}) & \delta\tilde{\mathbb{H}}_-(\mathbf{k}) \\ -\delta\tilde{\mathbb{H}}_-(\mathbf{k}) & -\delta\tilde{\mathbb{H}}_+(\mathbf{k}) \end{bmatrix}, \quad (150)$$

donde

$$\delta\tilde{\mathbb{H}}_{\pm}(\mathbf{k}) = \tilde{\mathbb{M}}_b^{\dagger}(\mathbf{k}) \delta\tilde{\mathbb{H}}(\mathbf{k}) \tilde{\mathbb{M}}_a(\mathbf{k}) \pm \tilde{\mathbb{M}}_a^{\dagger}(\mathbf{k}) \delta\tilde{\mathbb{H}}(\mathbf{k}) \tilde{\mathbb{M}}_b(\mathbf{k}). \quad (151)$$

Finalmente, ya que se han obtenido todos los cálculos necesarios, el operador de evolución temporal de un período transformado a la base en la que $\mathbb{H}_0(\mathbf{k})$ es diagonal, es decir el operador $\mathbb{U}'(\mathbf{k}, \tau)$ está dado por,

$$\mathbb{U}'(\mathbf{k}, \tau) = -i \frac{\sin[\tau\delta E(k_y)]}{\delta E(k_y)} \times \begin{bmatrix} (\cos[\tau\delta E(k_y)] + \delta\tilde{\mathbb{H}}_+(\mathbf{k})) \tilde{\mathbb{U}}_0(\mathbf{k}, \tau) & \delta\mathbb{H}_-(\mathbf{k}) \tilde{\mathbb{U}}_0^*(\mathbf{k}, \tau) \\ -\delta\mathbb{H}_-(\mathbf{k}) \tilde{\mathbb{U}}_0(\mathbf{k}, \tau) & (\cos[\tau\delta E(k_y)] - \delta\tilde{\mathbb{H}}_+(\mathbf{k})) \tilde{\mathbb{U}}_0^*(\mathbf{k}, \tau) \end{bmatrix} \quad (152)$$

donde $\mathbb{U}'(\mathbf{k}, \tau) = \mathbb{O}^{\dagger}(\mathbf{k})\mathbb{U}(\mathbf{k}, \tau)\mathbb{O}(\mathbf{k})$ and

$$\tilde{\mathbb{U}}_0(\mathbf{k}, \tau) = \begin{bmatrix} e^{i\tau E_1(\mathbf{k})} & 0 \\ 0 & e^{i\tau E_2(\mathbf{k})} \end{bmatrix}. \quad (153)$$

Hasta ahora hemos obtenido la expresión cerrada del operador de evolución temporal de un período $\mathbb{U}'(\mathbf{k}, \tau)$ para cualquier valor de \mathbf{k} . Lo que sigue es calcular dicho operador de evolución temporal para una rebana unidimensional de nuestro sistema, es decir, calcularemos la forma explícita del operador $\mathbb{U}'(\mathbf{k}, \tau)$ para un valor dado de k_x , en particular consideraremos el caso en el que $k_x = 0$. Es interesante que para el caso $k_x = 0$, el operador $\mathbb{U}'(\mathbf{k}, \tau)$ se vuelve diagonal por bloques, donde cada uno de los bloques es una matriz de tamaño 2×2 . Si reemplazamos $\mathbf{k} = (0, k_y)$ en la ecuación (152), obtenemos que,

$$\mathbb{U}'(k_x = 0, k_y, \tau) = \begin{bmatrix} e^{i\tau\delta\tilde{h}(k_y)} e^{i\tau\tilde{h}_0(k_y)} & 0 \\ 0 & e^{-i\tau\delta\tilde{h}(k_y)} e^{-i\tau\tilde{h}_0(k_y)} \end{bmatrix} \quad (154)$$

donde

$$\begin{aligned} \delta\tilde{h}(k_y) &= \delta h(k_y) \delta\hat{\mathbf{h}} \cdot \sigma, \\ \tilde{h}_0(k_y) &= \mathbb{I}_{2 \times 2} + 2 \cos(\sqrt{3}k_y/2) \sigma_z, \end{aligned} \quad (155)$$

con $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, σ_i ($i = x, y, z$) son las matrices de Pauli escritas en la base en la que σ_z es diagonal y las componentes de $\delta\hat{\mathbf{h}}$ están dadas por,

$$\begin{aligned} \delta h^{(y)} &= (\gamma_1 - \gamma_2) \sin(\sqrt{3}k_y/2), \\ \delta h^{(z)} &= (\gamma_1 + \gamma_2 - 2) \cos(\sqrt{3}k_y/2). \end{aligned} \quad (156)$$

también hemos usado la siguiente definición $\delta h(k_y) = |\delta \mathbf{h}|$. La ecuación (154) puede ser reducida aún más si usamos la regla de suma del grupo $SU(2)$. Después de algunas manipulaciones algebraicas uno encuentra que,

$$\mathbb{U}'(\tau) = \begin{bmatrix} e^{i\tau\tilde{h}_{\text{eff}}(k_y)} & 0 \\ 0 & e^{-i\tau\tilde{h}_{\text{eff}}(k_y)} \end{bmatrix} \quad (157)$$

donde

$$\tilde{h}_{\text{eff}}(k_y) = \mathbb{I}_{2 \times 2} + \Omega(k_y) \hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (158)$$

donde $\Omega(k_y)$ está dada por

$$\cos[\tau\Omega(k_y)] = \cos(\tau\delta h) \cos\left[2\tau \cos\left(\sqrt{3}k_y/2\right)\right] - \frac{\delta h^{(z)}}{\delta h} \sin(\tau\delta h) \sin\left[2\tau \cos\left(\sqrt{3}k_y/2\right)\right]. \quad (159)$$

Finalmente, el vector unitario $\hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}$ está dado por la siguiente expresión,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}} = \frac{1}{\sin[\tau\Omega(k_y)]} & \left\{ \delta \hat{\mathbf{h}} \sin(\tau\delta h) \cos\left[2\tau \cos\left(\sqrt{3}k_y/2\right)\right] + \hat{e}_z \cos(\tau\delta h) \sin\left[2\tau \cos\left(\sqrt{3}k_y/2\right)\right] \right. \\ & \left. - \delta h^{(y)} \hat{e}_x \sin(\tau\delta h) \sin\left[2\tau \cos\left(\sqrt{3}k_y/2\right)\right] \right\}. \end{aligned} \quad (160)$$

Nótese que las cuasi energías de nuestro sistema para $k_x = 0$ están dadas por los eigenvalores del operador de evolución temporal de un período, Ec. (157). Denotaremos como $\tau\omega(k_y)$ ha dichas cuasi energías, las cuales están dadas por,

$$\tau\omega(k_y) = \tau[\pm 1 + \Omega(k_y)]. \quad (161)$$

La información topológica de nuestro sistema para $\sigma = 1/\sqrt{3}$ y $k_x = 0$ está contenida en el Hamiltoniano efectivo (158). Es ilustrativo obtener las condiciones necesarias para la emergencia de estados de borde. Dicha información puede ser obtenida de por medio del estudio de las propiedades topológicas del Hamiltoniano (158). Debido a que los estados de borde emergerán por primera vez cuando las bordes de banda superior e inferior se crucen por vez primera, iniciaremos nuestro análisis por obtener dichos bordes de banda. Como se mencionó anteriormente, los valores extremos el espectro de cuasi energías se encuentran en $k_x = k_x^* = 0$ y $k_y = k_y^* = 0$. Sustituyendo dichos valores en la Ec. (161) y usando la ecuación (159) uno obtiene lo siguiente,

$$\tau\omega_{\pm} = \tau(\pm 1 + \gamma_1 + \gamma_2). \quad (162)$$

La condición necesaria para que los bordes de banda inferior y superior se crucen al valor crítico de τ , denotado como τ_c , es la siguiente,

$$\tau_c(\omega_+ \pm \omega_-) = 2\pi. \quad (163)$$

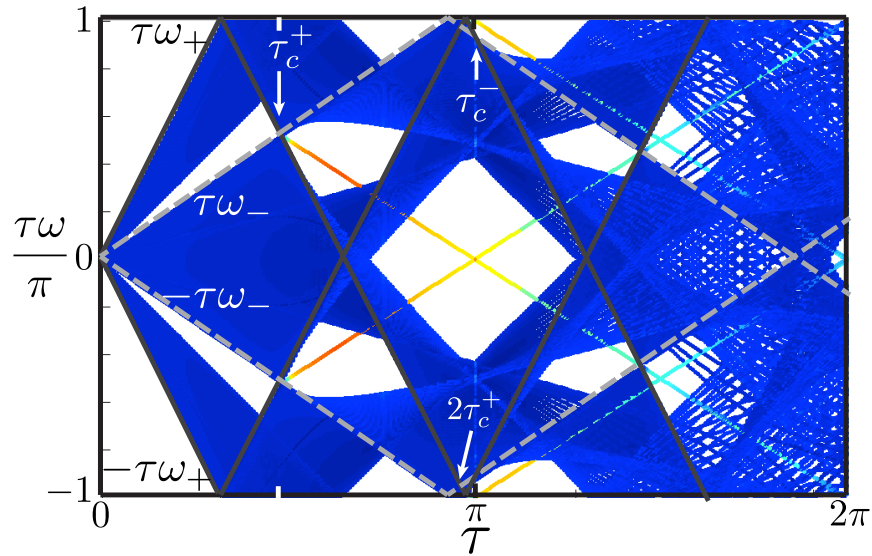


Figura 44: Espectro de quasi energías para $k_x = 0$ como una función de τ obtenido por medio de la diagonalización numérica de la Ec. (128) usando $N = 324$, $\sigma = 1/\sqrt{3}$, $\lambda = 0,2$, $\phi = \pi\sigma$ y condiciones de frontera fijas comparada con los bordes de la estructura de bandas obtenidos de la expresión analítica dada por la Ec. (162) y la Ec. (164). El borde la quasi energía $\tau\omega^+$ ($\tau\omega^-$) está representado por líneas sólidas negras (líneas punteadas grises). Nótese que los bordes de banda se cruzan por primera vez en $\tau = \tau_c^\pm$ a quasi energías distintas de cero o $\pm\pi$. Es interesante notar que para $\tau = \tau_c^+$ emergen estados de borde, lo que no sucede para los cruces en τ_c^- . Esto hecho está relacionado a la naturaleza de dichos cruces. También obsérvese que los estados de borde no son bandas planas sino que dependen linealmente de τ .

Si usamos la Ec. (162) obtenemos dos valores críticos para τ dados por las siguientes expresiones,

$$\begin{aligned}\tau_c^+ &= \frac{\pi}{\gamma_1 + \gamma_2}, \\ \tau_c^- &= \pi.\end{aligned}\tag{164}$$

Todos los demás cruces pueden ser obtenidos de $m\tau_c^\pm$, donde m es un número entero. Para entender el análisis previo es útil verlo de manera gráfica y compararlo con resultados numéricos. En la Fig. 44 hemos graficado el espectro de cuasi energías para $k_x = 0$ como una función de τ obtenido por medio de la diagonalización numérica del operador de evolución temporal de un período $U(k_x, \tau)$ usando $N = 324$, $\sigma = 1/\sqrt{3}$, $\lambda = 0,2$, $\phi = \pi\sigma$ y condiciones de frontera fijas. En dicha figura uno puede ver los bordes de banda $\pm\tau\omega^\pm$ ($\pm\tau\omega^\pm$) calculados usando la Ec. (162), los cuales están indicados en la figura por líneas sólidas negras (punteadas grises). Los valores críticos de τ obtenidos de la ecuación (164) son mostrados también en la Fig. 44. Nótese como los resultados numéricos y los resultados analíticos coinciden.

Observe en la Fig. 44 como los borde de banda $\tau\omega^\pm$ inician en cero para $\tau = 0$. Conforme una incrementa el valor de τ , $\tau\omega^+$ y $\tau\omega^-$ comienzan a crecer de manera lineal en τ pero con pendientes diferentes. Debido a que $\omega^+ \geq \omega^-$, ω^+ alcanza primero el límite de la zona de Floquet. Entonces, si incrementamos aún más el valor de τ , ω^+ y ω^- se cruzan en τ_c^+ . Si seguimos incrementando el valor de τ un nuevo cruce de bordes de banda aparece en τ_c^- . Es interesante que los único crucen que dan lugar a la emergencia de estados de borde son aquellos que surgen cuando $\tau = m\tau_c^+$. Los otros cruces (en $m\tau_c^-$), no se abre ninguna brecha energética secular, por lo tanto, no emergen estados de borde. Esto puede explicarse de la siguiente manera. Para los puntos en $\tau = m\tau_+$ tenemos una inversión de bandas, mientras que para los cruces en $\tau = m\tau_-$ los bordes de banda se cruzan pero no se invierten. Dado que la inversión de bandas es el mecanismo general detrás de la emergencia de estados de borde topológicamente no triviales, uno espera que no aparezcan estados de borde para el caso en que τ toma los valores dados por $\tau = m\tau_-$.

Es interesante notar que para $\tau = \tau_c^+$ los bordes de banda no se cruzan a cuasi energías cero o $\pm\pi$, sino a cuasi energías dadas por,

$$\tau_c^+\omega_\pm = \pi \pm \frac{\pi}{\gamma_1 + \gamma_2}.\tag{165}$$

A diferencia del caso de nanocintas de grafeno con terminación zigzag sometidas a deformaciones mecánicas moduladas periódicamente en el tiempo, el valor de la cuasi energía al cual los bordes de banda se tocan es diferente de cero o $\pm\pi$. Otra diferencia con el caso zigzag es que los estados de borde que emergen de dichos cruces no son bandas planas sino estados de borde unidireccionales, es decir, son estados de borde que crecen linealmente con τ , ver Fig. 44. Adicionalmente, a medida que τ crece, los estados de borde observados en la Fig. 44 comienzan a volverse más extendidos. De hecho, cuando τ alcanza el valor de 2π estos estados son casi totalmente extendidos.

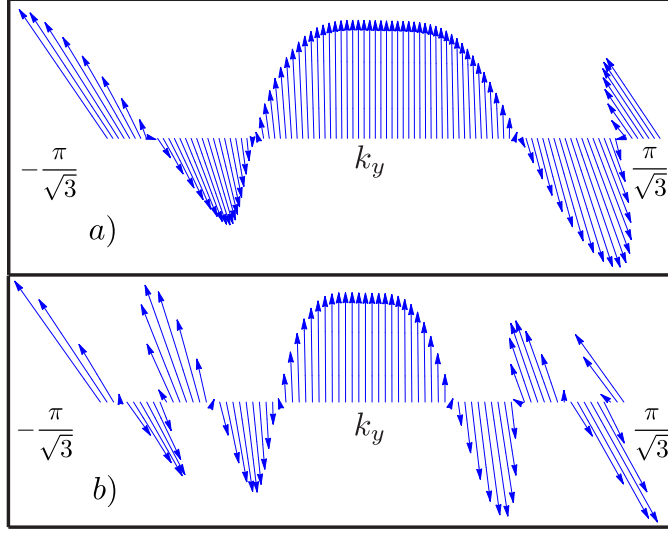


Figura 45: Aquí se muestra el *winding* del vector unitario $\hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(k_y)$ para $k_x = 0$, $\lambda = 0,2$, $\sigma = 1/\sqrt{3}$ y $\phi = \pi\sigma$ usando $\tau = \pi$ para el panel a) y $\tau = 2\pi$ para el panel b). El número de *winding* para el panel a) es 2, mientras que para el panel b) es 4. Observe que al incrementar el valor del período de la modulación también se incrementa el número de *winding*.

Para finalizar, mostraremos que los estados de borde que emergen de la inversión de bandas para valores de τ dados por $\tau = \tau_c^+$ son topológicamente no triviales, esto lo haremos para valores fijos de λ . Estudiaremos la topología de dichos estados para una rebana unidimensional del sistema completo usando el Hamiltoniano efectivo definido en la Ec. (158). Es bien sabido que para tener propiedades topológicas no triviales, el número de winding del vector unitario $\hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(k_y)$ alrededor del origen debe ser distinto de cero. En la Fig. 45, mostramos gráficamente el winding del vector unitario $\hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(k_y)$ para los siguientes valores de los parámetros $k_x = 0$, $\lambda = 0,2$, $\phi = \pi\sigma$ y $\sigma = 1/\sqrt{3}$, hemos usado que $\tau = \pi$ para el panel a) $\tau = 2\pi$ para el panel b). Como puede verse en la Fig. 45, el número de winding para este caso particular es 2 para el panel a) y 4 para el panel b). Se sigue que nuestro sistema tiene propiedades topológicas no triviales para el caso en el $k_x = 0$, es decir, para una rebana unidimensional del sistema 2D. Sin embargo, nada se puede decir acerca de la topología del sistema 2D, salvo que al menos posee una naturaleza topológica débil.

10.4. Conclusiones

En este capítulo observamos la emergencia de estados de borde en nanocintas de grafeno con terminación armchair sometidas a deformaciones mecánicas moduladas periódicamente en el tiempo. Los resultados fueron obtenidos por medio de cálculos numéricos como por medio de cálculos analíticos para algunos caso particulares. Se encontró que nuestro sistema modelo es capaz de albergar dos fases, a saber, una en la que existe una brecha energética distinta de cero alrededor del cero de la cuasi energías (este es el caso para $\sigma = 0,5/\sqrt{3}$), mientras que en la otra fase no hay brecha energética (por ejemplo, $\sigma = 1/\sqrt{3}$). La naturaleza del espectro de cuasi

energías fue entendida en términos de las simetrías del Hamiltoniano efectivo que describe el sistema, en particular, se encontró que dicho Hamiltoniano posee simetría chiral, lo que conduce a un espectro de cuasi energías simétrico con respecto al cero de la cuasi energía. En la fase en la que el sistema tiene una brecha energética distinta de cero alrededor del cero de la cuasi energía se encontraron estados de borde altamente localizados en los bordes de la nanocinta. Estos estados, debido a la simetría chiral del sistema, son topológicamente triviales desde el punto de vista del número de Chern. Dado que estados de borde aparecen a pesar de que el número de Chern es cero para esta brecha energética (la brecha energética alrededor del cero de la cuasi energía) uno infiere una de dos cosas: a) o se necesita un nuevo invariante topológico para caracterizar al sistema (un invariante diferente al número de Chern); b) o los estados de borde observados en este capítulo no son topológicamente fuertes, es decir, tienen un carácter topológico débil. Desde mi punto de vista me inclino por la opción b), pues los estados de borde que observamos para esta fase del sistema tienen una dispersión lineal a bajas cuasi energías y, además, se cruzan en un punto que es simétrico ante reversión temporal (se cruzan en $k_x = 0$), ambas características son huellas que indican la presencia de estados de borde topológicamente no triviales en aislantes topológicos. Adicionalmente, esta fase también tiene estados de borde que aparecen cada vez que una brecha energética secular se abre, por lo que un análisis más detallado acerca de la topología de tales estados es necesario.

Por otro lado, para la fase del sistema en la que no se abre ninguna brecha energética ni a cuasi energía cero ni a cuasi energías $\pm\pi$ hemos encontrados las condiciones necesarias para la emergencia de estados de borde. Además, por medio del estudio de una rebana unidimensional del sistema, fuimos capaces de obtener analíticamente el espectro de cuasi energías para el caso en el que $k_x = 0$. Esto fue posible porque, para $k_x = 0$, el Hamiltoniano efectivo se vuelve una matriz de tamaño 4×4 que es diagonal por bloques. Al estudiar el winding de dicho Hamiltoniano efectivo y encontrar que el número de winding alrededor del origen es cero concluimos que la rebana unidimensional de nuestro sistema para $k_x = 0$ es topológicamente no trivial. Lo que implica que el sistema completo (esto es, el sistema 2D) posee al menos un carácter topológico débil. Sin embargo, un análisis más detallado acerca de la topología del sistema es necesario.

Parte IV
Bibliografía

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, "Electric field effect in atomically thin carbon films," *Science*, vol. 306, no. 5696, pp. 666–669, 2004.
- [2] P. R. Wallace, "The band theory of graphite," *Phys. Rev.*, vol. 71, pp. 622–634, May 1947.
- [3] H. P. Boehm, A. Clauss, G. O. Fischer, and U. Hofmann, "Das adsorptionsverhalten sehr dünner kohlenstoff-folien," *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie*, vol. 316, no. 3-4, pp. 119–127, 1962.
- [4] K. F. Mak, M. Y. Sfeir, Y. Wu, C. H. Lui, J. A. Misewich, and T. F. Heinz, "Measurement of the optical conductivity of graphene," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101, p. 196405, Nov 2008.
- [5] R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres, and A. K. Geim, "Fine structure constant defines visual transparency of graphene," *Science*, vol. 320, no. 5881, pp. 1308–1308, 2008.
- [6] J. C. Meyer, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, T. J. Booth, and S. Roth, "The structure of suspended graphene sheets," *Nature*, vol. 446, pp. 60–63, mar 2007.
- [7] J. Wang, S. Deng, Z. Liu, and Z. Liu, "The rare two-dimensional materials with dirac cones," *National Science Review*, vol. 2, no. 1, pp. 22–39, 2015.
- [8] A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao, and C. N. Lau, "Superior thermal conductivity of single-layer graphene," *Nano Letters*, vol. 8, no. 3, pp. 902–907, 2008.
- [9] C. Gómez-Navarro, M. Burghard, and K. Kern, "Elastic properties of chemically derived single graphene sheets," *Nano Letters*, vol. 8, no. 7, pp. 2045–2049, 2008.
- [10] T. J. Booth, P. Blake, R. R. Nair, D. Jiang, E. W. Hill, U. Bangert, A. Bleloch, M. Gass, K. S. Novoselov, M. I. Katsnelson, and A. K. Geim, "Macroscopic graphene membranes and their extraordinary stiffness," *Nano Letters*, vol. 8, no. 8, pp. 2442–2446, 2008.
- [11] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, "Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene," *Science*, vol. 321, no. 5887, pp. 385–388, 2008.
- [12] G. G. Naumis and P. Roman-Taboada, "Mapping of strained graphene into one-dimensional hamiltonians: Quasicrystals and modulated crystals," *Phys. Rev. B*, vol. 89, p. 241404, Jun 2014.
- [13] H. Suzuura and T. Ando, "Phonons and electron-phonon scattering in carbon nanotubes," *Phys. Rev. B*, vol. 65, p. 235412, May 2002.

- [14] A. F. Morpurgo and F. Guinea, “Intervalley scattering, long-range disorder, and effective time-reversal symmetry breaking in graphene,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 97, p. 196804, Nov 2006.
- [15] M. Vozmediano, M. Katsnelson, and F. Guinea, “Gauge fields in graphene,” *Physics Reports*, vol. 496, no. 4–5, pp. 109 – 148, 2010.
- [16] A. L. Kitt, V. M. Pereira, A. K. Swan, and B. B. Goldberg, “Lattice-corrected strain-induced vector potentials in graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 85, p. 115432, Mar 2012.
- [17] F. de Juan, J. L. Mañes, and M. A. H. Vozmediano, “Gauge fields from strain in graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 87, p. 165131, Apr 2013.
- [18] A. L. Kitt, V. M. Pereira, A. K. Swan, and B. B. Goldberg, “Erratum: Lattice-corrected strain-induced vector potentials in graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 87, p. 159909, Apr 2013.
- [19] J. V. Sloan, A. A. P. Sanjuan, Z. Wang, C. Horvath, and S. Barraza-Lopez, “Strain gauge fields for rippled graphene membranes under central mechanical load: An approach beyond first-order continuum elasticity,” *Phys. Rev. B*, vol. 87, p. 155436, Apr 2013.
- [20] V. M. Pereira, A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres, “Tight-binding approach to uniaxial strain in graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 80, p. 045401, Jul 2009.
- [21] P. Roman-Taboada and G. G. Naumis, “Topological flat bands in time-periodically driven uniaxial strained graphene nanoribbons,” *Physical Review B*, vol. 95, no. 11, p. 115440, 2017.
- [22] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, “The electronic properties of graphene,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 81, pp. 109–162, Jan 2009.
- [23] A. Cresti, N. Nemeč, B. Biel, G. Niebler, F. Triozon, G. Cuniberti, and S. Roche, “Charge transport in disordered graphene-based low dimensional materials,” *Nano Research*, vol. 1, no. 5, pp. 361–394, 2008.
- [24] L. Malysheva and A. Onipko, “Spectrum of π electrons in graphene as a macromolecule,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 100, p. 186806, May 2008.
- [25] V. M. Pereira and A. H. Castro Neto, “Strain engineering of graphene’s electronic structure,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 103, p. 046801, Jul 2009.
- [26] F. Guinea, “Strain engineering in graphene,” *Solid State Communications*, vol. 152, no. 15, pp. 1437 – 1441, 2012. Exploring Graphene, Recent Research Advances.

- [27] D. Zhan, J. Yan, L. Lai, Z. Ni, L. Liu, and Z. Shen, “Engineering the electronic structure of graphene,” *Advanced Materials*, vol. 24, no. 30, pp. 4055–4069, 2012.
- [28] K. S. Kim, Y. Zhao, H. Jang, S. Y. Lee, J. M. Kim, K. S. Kim, J.-H. Ahn, P. Kim, J.-Y. Choi, and B. H. Hong, “Large-scale pattern growth of graphene films for stretchable transparent electrodes,” *nature*, vol. 457, no. 7230, pp. 706–710, 2009.
- [29] K. S. Novoselov, E. McCann, S. Morozov, V. I. Fal’ko, M. Katsnelson, U. Zeitler, D. Jiang, F. Schedin, and A. Geim, “Unconventional quantum hall effect and berry’s phase of 2π in bilayer graphene,” *Nature physics*, vol. 2, no. 3, pp. 177–180, 2006.
- [30] A. Luican, G. Li, A. Reina, J. Kong, R. R. Nair, K. S. Novoselov, A. K. Geim, and E. Y. Andrei, “Single-layer behavior and its breakdown in twisted graphene layers,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 106, p. 126802, Mar 2011.
- [31] L. Ponomarenko, R. Gorbachev, G. Yu, D. Elias, R. Jalil, A. Patel, A. Mishchenko, A. Mayorov, C. Woods, J. Wallbank, *et al.*, “Cloning of dirac fermions in graphene superlattices,” *Nature*, vol. 497, no. 7451, pp. 594–597, 2013.
- [32] J. R. Wallbank, A. A. Patel, M. Mucha-Kruczyński, A. K. Geim, and V. I. Fal’ko, “Generic miniband structure of graphene on a hexagonal substrate,” *Phys. Rev. B*, vol. 87, p. 245408, Jun 2013.
- [33] A. Sommerfeld, *Mechanics of deformable bodies: Lectures on theoretical physics*. Lectures on theoretical physics, Academic Press, 1950.
- [34] F. Guinea, M. I. Katsnelson, and A. K. Geim, “Energy gaps and a zero-field quantum Hall effect in graphene by strain engineering,” *Nat. Phys.*, vol. 6, pp. 30–33, Jan. 2010.
- [35] T. Low and F. Guinea, “Strain-induced pseudomagnetic field for novel graphene electronics,” *Nano letters*, vol. 10, no. 9, pp. 3551–3554, 2010.
- [36] Y. Zhang and F. Liu, “Maximum asymmetry in strain induced mechanical instability of graphene: Compression versus tension,” *Applied Physics Letters*, vol. 99, no. 24, pp.–, 2011.
- [37] W. Lu, P. Soukiassian, and J. Boeckl, “Graphene: Fundamentals and functionalities,” *MRS Bulletin*, vol. 37, pp. 1119–1124, 12 2012.
- [38] R. M. Ribeiro, V. M. Pereira, N. M. R. Peres, P. R. Briddon, and A. H. C. Neto, “Strained graphene: tight-binding and density functional calculations,” *New Journal of Physics*, vol. 11, no. 11, p. 115002, 2009.

- [39] M. Settnes, S. R. Power, and A.-P. Jauho, “Pseudomagnetic fields and triaxial strain in graphene,” *Physical Review B*, vol. 93, no. 3, p. 035456, 2016.
- [40] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, “Understanding electron behavior in strained graphene as a reciprocal space distortion,” *Phys. Rev. B*, vol. 88, p. 085430, Aug 2013.
- [41] M. Neek-Amal, L. Covaci, K. Shakouri, and F. M. Peeters, “Electronic structure of a hexagonal graphene flake subjected to triaxial stress,” *Phys. Rev. B*, vol. 88, p. 115428, Sep 2013.
- [42] G. G. Naumis, “Internal mobility edge in doped graphene: Frustration in a renormalized lattice,” *Phys. Rev. B*, vol. 76, p. 153403, Oct 2007.
- [43] N. A. Vinogradov, A. A. Zakharov, V. Kocevski, J. Ruzs, K. A. Simonov, O. Eriksson, A. Mikkelsen, E. Lundgren, A. S. Vinogradov, N. Mårtensson, and A. B. Preobrajenski, “Formation and structure of graphene waves on fe(110),” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 109, p. 026101, Jul 2012.
- [44] P. G. Harper, “Single band motion of conduction electrons in a uniform magnetic field,” *Proceedings of the Physical Society. Section A*, vol. 68, no. 10, p. 874, 1955.
- [45] D. R. Hofstadter, “Energy levels and wave functions of bloch electrons in rational and irrational magnetic fields,” *Phys. Rev. B*, vol. 14, pp. 2239–2249, Sep 1976.
- [46] D. DiVincenzo and P. Steinhardt, *Quasicrystals: The State of the Art*. Series on directions in condensed matter physics, World Scientific, 1999.
- [47] G. G. Naumis and F. López-Rodríguez, “The electronic spectrum of a quasiperiodic potential: From the hofstadter butterfly to the fibonacci chain,” *Physica B: Condensed Matter*, vol. 403, no. 10–11, pp. 1755 – 1762, 2008.
- [48] P. Soltan-Panahi, D.-S. Luhmann, J. Struck, P. Windpassinger, and K. Sengstock, “Quantum phase transition to unconventional multi-orbital superfluidity in optical lattices,” *Nat Phys*, vol. 8, pp. 71–75, Jan. 2012.
- [49] P. Soltan-Panahi, J. Struck, P. Hauke, A. Bick, W. Plenkers, G. Meineke, C. Becker, P. Windpassinger, M. Lewenstein, and K. Sengstock, “Multi-component quantum gases in spin-dependent hexagonal lattices,” *Nature Physics*, vol. 7, pp. 434–440, Feb. 2011.
- [50] G. Jotzu, M. Messer, R. Desbuquois, M. Lebrat, T. Uehlinger, D. Greif, and T. Esslinger, “Experimental realization of the topological Haldane model with ultracold fermions,” *Nature*, vol. 515, pp. 237–240, Nov. 2014.

- [51] M. Messer, R. Desbuquois, T. Uehlinger, G. Jotzu, S. Huber, D. Greif, and T. Esslinger, “Exploring competing density order in the ionic hubbard model with ultracold fermions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 115, p. 115303, Sep 2015.
- [52] M. Weinberg, C. Staarmann, C. Ölschläger, J. Simonet, and K. Sengstock, “Breaking inversion symmetry in a state-dependent honeycomb lattice: artificial graphene with tunable band gap,” *2D Materials*, vol. 3, no. 2, p. 024005, 2016.
- [53] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, “Effective dirac hamiltonian for anisotropic honeycomb lattices: Optical properties,” *Phys. Rev. B*, vol. 93, p. 035439, Jan 2016.
- [54] G. Montambaux, F. Piéchon, J.-N. Fuchs, and M. O. Goerbig, “Merging of dirac points in a two-dimensional crystal,” *Phys. Rev. B*, vol. 80, p. 153412, Oct 2009.
- [55] L.-K. Lim, J.-N. Fuchs, and G. Montambaux, “Bloch-zener oscillations across a merging transition of dirac points,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, p. 175303, Apr 2012.
- [56] G. G. Naumis, M. Terrones, H. Terrones, and L. M. Gaggero-Sager, “Design of graphene electronic devices using nanoribbons of different widths,” *Applied Physics Letters*, vol. 95, no. 18, pp.–, 2009.
- [57] E.-A. Kim and A. H. C. Neto, “Graphene as an electronic membrane,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 84, no. 5, p. 57007, 2008.
- [58] P. Delplace, D. Ullmo, and G. Montambaux, “Zak phase and the existence of edge states in graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 84, p. 195452, Nov 2011.
- [59] P. Roman-Taboada and G. G. Naumis, “Spectral butterfly, mixed dirac-schrödinger fermion behavior, and topological states in armchair uniaxial strained graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 90, p. 195435, Nov 2014.
- [60] Y.-Z. Chou and M. S. Foster, “Chalker scaling, level repulsion, and conformal invariance in critically delocalized quantum matter: Disordered topological superconductors and artificial graphene,” *Physical Review B*, vol. 89, no. 16, p. 165136, 2014.
- [61] A. A. Zyuzin and V. A. Zyuzin, “Anisotropic flat bands on the surface of a multilayer graphene-like lattice,” *JETP Letters*, vol. 102, no. 2, pp. 113–117, 2015.
- [62] M. R. Guassi, G. S. Diniz, N. Sandler, and F. Qu, “Zero-field and time-reversal-symmetry-broken topological phase transitions in graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 92, p. 075426, Aug 2015.

- [63] T. Mishra, T. G. Sarkar, and J. N. Bandyopadhyay, “Floquet analysis of pulsed dirac systems: a way to simulate rippled graphene,” *The European Physical Journal B*, vol. 88, no. 9, p. 231, 2015.
- [64] P. San-Jose, J. L. Lado, R. Aguado, F. Guinea, and J. Fernández-Rossier, “Majorana zero modes in graphene,” *Phys. Rev. X*, vol. 5, p. 041042, Dec 2015.
- [65] A. Iorio and P. Pais, “Revisiting the gauge fields of strained graphene,” *Phys. Rev. D*, vol. 92, p. 125005, Dec 2015.
- [66] V. Dal Lago and L. F. Torres, “Line defects and quantum hall plateaus in graphene,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 27, no. 14, p. 145303, 2015.
- [67] F. Qu, G. S. Diniz, and M. R. Guassi, “Electronic structure and topological quantum phase transitions in strained graphene nanoribbons,” in *Recent Advances in Graphene Research* (P. K. Nayak, ed.), ch. 03, Rijeka: InTech, 2016.
- [68] T. Frank, P. Högl, M. Gmitra, D. Kochan, and J. Fabian, “Protected pseudohelical edge states in proximity graphene ribbons and flakes,” *arXiv preprint arXiv:1707.02124*, 2017.
- [69] T. Cao, F. Zhao, and S. G. Louie, “Topological phases in graphene nanoribbons: Junction states, spin centers, and quantum spin chains,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 119, p. 076401, Aug 2017.
- [70] Y.-H. Wu, T. Shi, G. Sreejith, and Z.-X. Liu, “Fermionic symmetry-protected topological state in strained graphene,” *Physical Review B*, vol. 96, no. 8, p. 085138, 2017.
- [71] Z.-H. Wang, E. V. Castro, and H.-Q. Lin, “Strain manipulation of majorana fermions in graphene armchair nanoribbons,” *arXiv preprint arXiv:1708.00467*, 2017.
- [72] P. Delplace, A. Gómez-León, and G. Platero, “Merging of dirac points and floquet topological transitions in ac-driven graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 88, p. 245422, Dec 2013.
- [73] T. Iadecola, T. Neupert, and C. Chamon, “Topological gaps without masses in driven graphene-like systems,” *Phys. Rev. B*, vol. 89, p. 115425, Mar 2014.
- [74] G. Gumbs, A. Iurov, D. Huang, and L. Zhemchuzhna, “Revealing hofstadter spectrum for graphene in a periodic potential,” *Phys. Rev. B*, vol. 89, p. 241407, Jun 2014.
- [75] P. Perez-Piskunow, G. Usaj, C. Balseiro, and L. F. Torres, “Floquet chiral edge states in graphene,” *Physical Review B*, vol. 89, no. 12, p. 121401, 2014.

- [76] G. Usaj, P. M. Perez-Piskunow, L. E. F. Foa Torres, and C. A. Balseiro, “Irradiated graphene as a tunable floquet topological insulator,” *Phys. Rev. B*, vol. 90, p. 115423, Sep 2014.
- [77] L. P. Gavensky, G. Usaj, and C. Balseiro, “Photo-electrons unveil topological transitions in graphene-like systems,” *Scientific reports*, vol. 6, p. 36577, 2016.
- [78] F. Manghi, M. Puviani, and F. Lenzini, “Time evolution of floquet states in graphene,” *arXiv preprint arXiv:1702.06349*, 2017.
- [79] V. D. Lago, E. S. Morell, and L. E. Torres, “One-way transport in laser-illuminated bilayer graphene: A floquet isolator,” *arXiv preprint arXiv:1708.03304*, 2017.
- [80] L. E. F. Torres, S. Roche, and J.-C. Charlier, *Introduction to graphene-based nanomaterials: from electronic structure to quantum transport*. Cambridge University Press, 2014.
- [81] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, “Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene,” *Nature*, vol. 438, no. 7065, pp. 197–200, 2005.
- [82] T. T. Heikkilä, N. B. Kopnin, and G. E. Volovik, “Flat bands in topological media,” *JETP Letters*, vol. 94, no. 3, pp. 233–239, 2011.
- [83] G. E. Volovik, *The Universe in a Helium Droplet*. Clarendon Press ; Oxford University Press, May 2003.
- [84] G. E. Volovik, “Flat band in topological matter,” *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, vol. 26, no. 9, pp. 2887–2890, 2013.
- [85] A. A. Burkov, M. D. Hook, and L. Balents, “Topological nodal semimetals,” *Phys. Rev. B*, vol. 84, p. 235126, Dec 2011.
- [86] S. Rao, “Weyl semi-metals: A short review,” *Journal of the Indian Institute of Science*, vol. 96, no. 2, pp. 145–156, 2016.
- [87] F. J. López-Rodríguez and G. G. Naumis, “Analytic solution for electrons and holes in graphene under electromagnetic waves: Gap appearance and nonlinear effects,” *Phys. Rev. B*, vol. 78, p. 201406, Nov 2008.
- [88] F. López-Rodríguez and G. Naumis, “Graphene under perpendicular incidence of electromagnetic waves: Gaps and band structure,” *Philosophical Magazine*, vol. 90, no. 21, pp. 2977–2988, 2010.

- [89] R. W. Bomantara, G. N. Raghava, L. Zhou, and J. Gong, “Floquet topological semimetal phases of an extended kicked harper model,” *Phys. Rev. E*, vol. 93, p. 022209, Feb 2016.
- [90] H.-Q. Wang, M. N. Chen, R. W. Bomantara, J. Gong, and D. Y. Xing, “Line nodes and surface majorana flat bands in static and kicked p -wave superconducting harper model,” *Phys. Rev. B*, vol. 95, p. 075136, Feb 2017.
- [91] A. Kitaev, “Anyons in an exactly solved model and beyond,” *Annals of Physics*, vol. 321, no. 1, pp. 2 – 111, 2006. January Special Issue.
- [92] R. M. Lutchyn, J. D. Sau, and S. Das Sarma, “Majorana fermions and a topological phase transition in semiconductor-superconductor heterostructures,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 105, p. 077001, Aug 2010.
- [93] Wu, C. C., Sun, J., Huang, F. J., Li, Y. D., and Liu, W. M., “Majorana fermions in a periodically driven semiconductor-superconductor heterostructure,” *EPL*, vol. 104, no. 2, p. 27004, 2013.
- [94] D. I. Pikulin, C.-K. Chiu, X. Zhu, and M. Franz, “Interaction-enabled topological phases in topological insulator–superconductor heterostructures,” *Phys. Rev. B*, vol. 92, p. 075438, Aug 2015.
- [95] A. Y. Kitaev, “Unpaired majorana fermions in quantum wires,” *Physics-Uspekhi*, vol. 44, no. 10S, p. 131, 2001.
- [96] L. Jiang, T. Kitagawa, J. Alicea, A. R. Akhmerov, D. Pekker, G. Refael, J. I. Cirac, E. Demler, M. D. Lukin, and P. Zoller, “Majorana fermions in equilibrium and in driven cold-atom quantum wires,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 106, p. 220402, Jun 2011.
- [97] L.-J. Lang, X. Cai, and S. Chen, “Edge states and topological phases in one-dimensional optical superlattices,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, p. 220401, May 2012.
- [98] D.-L. Deng, S.-T. Wang, K. Sun, and L.-M. Duan, “Proposal for observing non-abelian statistics of majorana-shockley fermions in an optical lattice,” *Phys. Rev. B*, vol. 91, p. 094513, Mar 2015.
- [99] Y. Li-Jun, L. Li-Jun, L. Rong, and H. Hai-Ping, “Spin-orbit coupled s-wave superconductor in one-dimensional optical lattice,” *Communications in Theoretical Physics*, vol. 63, no. 4, p. 445, 2015.
- [100] L. Jiang, T. Kitagawa, J. Alicea, A. R. Akhmerov, D. Pekker, G. Refael, J. I. Cirac, E. Demler, M. D. Lukin, and P. Zoller, “Majorana fermions in equilibrium and in driven cold-atom quantum wires,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 106, p. 220402, Jun 2011.

- [101] M. Thakurathi, A. A. Patel, D. Sen, and A. Dutta, “Floquet generation of majorana end modes and topological invariants,” *Phys. Rev. B*, vol. 88, p. 155133, Oct 2013.
- [102] F. L. Pedrocchi, S. Chesi, and D. Loss, “Physical solutions of the kitaev honeycomb model,” *Phys. Rev. B*, vol. 84, p. 165414, Oct 2011.
- [103] O. Petrova, P. Mellado, and O. Tchernyshyov, “Unpaired majorana modes on dislocations and string defects in kitaev’s honeycomb model,” *Phys. Rev. B*, vol. 90, p. 134404, Oct 2014.
- [104] Dutreix, Clément, Guigou, Marine, Chevallier, Denis, and Bena, Cristina, “Majorana fermions in honeycomb lattices,” *Eur. Phys. J. B*, vol. 87, no. 12, p. 296, 2014.
- [105] J. Klinovaja, P. Stano, and D. Loss, “Topological floquet phases in driven coupled rashba nanowires,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 116, p. 176401, Apr 2016.
- [106] X.-L. Qi and S.-C. Zhang, “Topological insulators and superconductors,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 83, pp. 1057–1110, Oct 2011.
- [107] H.-Y. Hui, P. M. R. Brydon, J. D. Sau, S. Tewari, and S. D. Sarma, “Majorana fermions in ferromagnetic chains on the surface of bulk spin-orbit coupled s-wave superconductors,” *SCIENTIFIC REPORTS*, vol. 5, p. 8880, MAR 6 2015.
- [108] C. V. Kraus, M. Dalmonte, M. A. Baranov, A. M. Läuchli, and P. Zoller, “Majorana edge states in atomic wires coupled by pair hopping,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 111, p. 173004, Oct 2013.
- [109] G. Abal, R. Donangelo, A. Romanelli, A. C. Sicardi Schiffino, and R. Siri, “Dynamical localization in quasiperiodic driven systems,” *Phys. Rev. E*, vol. 65, p. 046236, Apr 2002.
- [110] C. E. Creffield, G. Hur, and T. S. Monteiro, “Localization-delocalization transition in a system of quantum kicked rotors,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 96, p. 024103, Jan 2006.
- [111] H. Wang, D. Y. H. Ho, W. Lawton, J. Wang, and J. Gong, “Kicked-harper model versus on-resonance double-kicked rotor model: From spectral difference to topological equivalence,” *Phys. Rev. E*, vol. 88, p. 052920, Nov 2013.
- [112] D. Y. H. Ho and J. Gong, “Topological effects in chiral symmetric driven systems,” *Phys. Rev. B*, vol. 90, p. 195419, Nov 2014.
- [113] J. N. Bandyopadhyay and T. Guha Sarkar, “Effective time-independent analysis for quantum kicked systems,” *Phys. Rev. E*, vol. 91, p. 032923, Mar 2015.

- [114] P. Dietl, F. Piéchon, and G. Montambaux, “New magnetic field dependence of Landau levels in a graphenelike structure,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 100, p. 236405, Jun 2008.
- [115] W. Shockley, “On the surface states associated with a periodic potential,” *Phys. Rev.*, vol. 56, pp. 317–323, Aug 1939.
- [116] S. Davison and M. Stešlicka, *Basic Theory of Surface States*. Monographs on the physics and chemistry of materials, Clarendon Press, 1992.
- [117] S. S. Pershoguba and V. M. Yakovenko, “Shockley model description of surface states in topological insulators,” *Phys. Rev. B*, vol. 86, p. 075304, Aug 2012.
- [118] L. Torres, S. Roche, and J. Charlier, *Introduction to Graphene-Based Nanomaterials: From Electronic Structure to Quantum Transport*. Introduction to Graphene-based Nanomaterials: From Electronic Structure to Quantum Transport, Cambridge University Press, 2014.
- [119] X.-L. Qi and S.-C. Zhang, “Topological insulators and superconductors,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 83, pp. 1057–1110, Oct 2011.
- [120] C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern, M. Freedman, and S. Das Sarma, “Non-abelian anyons and topological quantum computation,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 80, pp. 1083–1159, Sep 2008.
- [121] N. Ma, “Majorana fermions in condensed matter: An outlook,” *Physica B: Condensed Matter*, vol. 512, pp. 100 – 101, 2017.
- [122] I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, “Spintronics: Fundamentals and applications,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 76, pp. 323–410, Apr 2004.
- [123] T. Yokoyama and S. Murakami, “Spintronics and spin caloritronics in topological insulators,” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 55, pp. 1 – 8, 2014. Topological Objects.
- [124] C.-T. Wu, B. M. Anderson, W.-H. Hsiao, and K. Levin, “Majorana zero modes in spintronics devices,” *Phys. Rev. B*, vol. 95, p. 014519, Jan 2017.
- [125] J. E. Moore, “The birth of topological insulators,” *Nature*, vol. 464, pp. 194–198, 03 2010.
- [126] Y. L. Chen, J. G. Analytis, J.-H. Chu, Z. K. Liu, S.-K. Mo, X. L. Qi, H. J. Zhang, D. H. Lu, X. Dai, Z. Fang, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, “Experimental realization of a three-dimensional topological insulator, Bi_2Te_3 ,” *Science*, vol. 325, no. 5937, pp. 178–181, 2009.

- [127] I. I. Satija and G. G. Naumis, “Chern and majorana modes of quasiperiodic systems,” *Phys. Rev. B*, vol. 88, p. 054204, Aug 2013.
- [128] J. C. Avila, H. Schulz-Baldes, and C. Villegas-Blas, “Topological invariants of edge states for periodic two-dimensional models,” *Mathematical Physics, Analysis and Geometry*, vol. 16, pp. 137–170, Jun 2013.
- [129] J. Cayssol, B. Dóra, F. Simon, and R. Moessner, “Floquet topological insulators,” *physica status solidi (RRL) – Rapid Research Letters*, vol. 7, no. 1-2, pp. 101–108, 2013.
- [130] M. Thakurathi, K. Sengupta, and D. Sen, “Majorana edge modes in the kitaev model,” *Phys. Rev. B*, vol. 89, p. 235434, Jun 2014.
- [131] H. Dehghani and A. Mitra, “Optical hall conductivity of a floquet topological insulator,” *Phys. Rev. B*, vol. 92, p. 165111, Oct 2015.
- [132] C. Yuce, “Pt symmetric floquet topological phase,” *The European Physical Journal D*, vol. 69, p. 184, Jul 2015.
- [133] N. Sedlmayr, J. M. Aguiar-Hualde, and C. Bena, “Flat majorana bands in two-dimensional lattices with inhomogeneous magnetic fields: Topology and stability,” *Phys. Rev. B*, vol. 91, p. 115415, Mar 2015.
- [134] V. Dal Lago, M. Atala, and L. E. F. Foa Torres, “Floquet topological transitions in a driven one-dimensional topological insulator,” *Phys. Rev. A*, vol. 92, p. 023624, Aug 2015.
- [135] N. Sedlmayr, J. M. Aguiar-Hualde, and C. Bena, “Majorana bound states in open quasi-one-dimensional and two-dimensional systems with transverse rashba coupling,” *Phys. Rev. B*, vol. 93, p. 155425, Apr 2016.
- [136] H. Dehghani and A. Mitra, “Floquet topological systems in the vicinity of band crossings: Reservoir-induced coherence and steady-state entropy production,” *Phys. Rev. B*, vol. 93, p. 245416, Jun 2016.
- [137] A. Agarwala, U. Bhattacharya, A. Dutta, and D. Sen, “Effects of periodic kicking on dispersion and wave packet dynamics in graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 93, p. 174301, May 2016.
- [138] Bhattacharya, Utso, Dasgupta, Sayak, and Dutta, Amit, “Dynamical merging of dirac points in the periodically driven kitaev honeycomb model,” *Eur. Phys. J. B*, vol. 89, no. 10, p. 216, 2016.

- [139] R. S. Akzayanov, A. L. Rakhmanov, A. V. Rozhkov, and F. Nori, “Tunable majorana fermion from landau quantization in 2d topological superconductors,” *Phys. Rev. B*, vol. 94, p. 125428, Sep 2016.
- [140] A. Agarwala and V. B. Shenoy, “Topological insulators in amorphous systems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 118, p. 236402, Jun 2017.
- [141] P. Roman-Taboada and G. G. Naumis, “Topological flat bands in time-periodically driven uniaxial strained graphene nanoribbons,” *Phys. Rev. B*, vol. 95, p. 115440, Mar 2017.
- [142] M. Thakurathi, D. Loss, and J. Klinovaja, “Floquet majorana fermions and parafermions in driven rashba nanowires,” *Phys. Rev. B*, vol. 95, p. 155407, Apr 2017.
- [143] T. Kitagawa, E. Berg, M. Rudner, and E. Demler, “Topological characterization of periodically driven quantum systems,” *Phys. Rev. B*, vol. 82, p. 235114, Dec 2010.
- [144] T. Kitagawa, M. A. Broome, A. Fedrizzi, M. S. Rudner, E. Berg, I. Kassal, A. Aspuru-Guzik, E. Demler, and A. G. White, “Observation of topologically protected bound states in photonic quantum walks,” *Nature*, vol. 3, pp. 882 EP –, 06 2012.
- [145] B. M. Fregoso, Y. H. Wang, N. Gedik, and V. Galitski, “Driven electronic states at the surface of a topological insulator,” *Phys. Rev. B*, vol. 88, p. 155129, Oct 2013.
- [146] M. Benito, A. Gómez-León, V. M. Bastidas, T. Brandes, and G. Platero, “Floquet engineering of long-range p -wave superconductivity,” *Phys. Rev. B*, vol. 90, p. 205127, Nov 2014.
- [147] T. Ochiai, “Floquet–weyl and floquet-topological-insulator phases in a stacked two-dimensional ring-network lattice,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 28, no. 42, p. 425501, 2016.
- [148] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, “Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions,” *Phys. Rev. B*, vol. 78, p. 195125, Nov 2008.
- [149] G. M. Graf and M. Porta, “Bulk-edge correspondence for two-dimensional topological insulators,” *Communications in Mathematical Physics*, vol. 324, pp. 851–895, Dec 2013.
- [150] D. Carpentier, P. Delplace, M. Fruchart, K. Gawędzki, and C. Tauber, “Construction and properties of a topological index for periodically driven time-reversal invariant 2d crystals,” *Nuclear Physics B*, vol. 896, pp. 779 – 834, 2015.

- [151] F. Nathan and M. S. Rudner, “Topological singularities and the general classification of floquet–bloch systems,” *New Journal of Physics*, vol. 17, no. 12, p. 125014, 2015.
- [152] S.-M. Choi, S.-H. Jhi, and Y.-W. Son, “Effects of strain on electronic properties of graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 81, p. 081407, Feb 2010.
- [153] G. G. Naumis, S. Barraza-Lopez, M. Oliva-Leyva, and H. Terrones, “Electronic and optical properties of strained graphene and other strained 2d materials: a review,” *Reports on Progress in Physics*, 2017.
- [154] M. Fruchart, “Complex classes of periodically driven topological lattice systems,” *Phys. Rev. B*, vol. 93, p. 115429, Mar 2016.

Parte V
Artículos Publicados

Artículo A

Mapping of strained graphene into one-dimensional Hamiltonians:
Quasicrystals and modulated crystals

G. G. Naumis, Pedro Roman-Taboada

El artículo ha sido publicado en
Physical Review B Vol. 89, pp. 241404(R), 2014.

The layout has been revised.

Mapping of strained graphene into one-dimensional Hamiltonians: Quasicrystals and modulated crystals

Gerardo G. Naumis* and Pedro Roman-Taboada

Departamento de Física-Química, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Apartado Postal 20-364, 01000 México, Distrito Federal, México

(Received 27 March 2014; revised manuscript received 28 May 2014; published 11 June 2014)

The electronic properties of graphene under any arbitrary uniaxial strain field are obtained by an exact mapping of the corresponding tight-binding Hamiltonian into an effective one-dimensional modulated chain. For a periodic modulation, the system displays a rich behavior, including quasicrystals and modulated crystals with a complex spectrum, including gaps and peaks at the Fermi energy and localization transitions. All these features are explained by the incommensurate or commensurate nature of the potential, which leads to a dense filling by diffraction spots of the reciprocal space in the former case. The essential features of strain are made specially clear by analyzing a special momenta that uncouples the model into dimers.

DOI: [10.1103/PhysRevB.89.241404](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.241404)

PACS number(s): 73.22.Pr, 71.23.Ft, 03.65.Vf

Graphene is a two-dimensional (2D) carbon crystal [1]. This atom-thin elastic membrane has amazing physical properties [1–4]. Notably, graphene has the highest known interval of elastic response (up to 20% of the lattice parameter [5]). The tailoring of its electronic properties by controlled mechanic deformation is a field known as “straintronics” [6–9]. Also, graphene seems to be the ideal candidate to replace Si in transistors. However, when graphene grows in top of a substrate with different lattice parameters or structure, strain and corrugation appear [10]. The understanding of how strain affects the graphene’s electronic properties is clearly a fundamental issue, still in the process of development [11–17]. How strain affects the electronic spectrum and wave functions? By mapping the limiting case of any uniaxial strain to an effective one-dimensional Hamiltonian, we prove that the answer is unexpectedly rich. As we will see, in certain circumstances strain promotes a quasiperiodic fractal electronic behavior due to the complex self-similar structure of the reciprocal space. Furthermore, it is known that a fractal behavior can be obtained in rotated bilayer graphene under magnetic fields [18–21]. Here we prove that a similar effect can be achieved by strain in single-layer graphene. Such effect should be generated by growing graphene in top of a crystal with a slightly different lattice parameter, as is now technically feasible [20]. As is known, this leads to a periodic strain [10]. Then a quasiperiodic behavior should be obtained when the ratio of lattice parameters becomes incommensurate. Other two-dimensional materials like MoS₂ or NiSe₂ are expected to present the same effect [22–24].

Let us start with a zigzag graphene nanoribbon, as shown in Fig. 1, with a uniaxial strain applied in the y direction. Although our methodology can be applied for uniaxial strain in the zigzag or arm chair directions, here we will concentrate only in one kind, since we want to bring out the essential features of the model.

The new positions of the carbon atoms are $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{u}(y)$, where $\mathbf{r} = (x, y)$ are the unstrained coordinates of the atoms and $\mathbf{u}(y) = (0, u(y))$ is the corresponding displacement. The

electronic properties of graphene are well described by a one orbital next-nearest neighbor tight-binding Hamiltonian in a honeycomb lattice, given by [4]

$$H = - \sum_{\mathbf{r}', n} t_{\mathbf{r}', n} c_{\mathbf{r}'}^\dagger c_{\mathbf{r}'+\delta'_n} + \text{H.c.}, \quad (1)$$

where \mathbf{r}' runs over all sites of the deformed lattice and δ'_n are the corresponding vectors that point to the three next nearest neighbors of \mathbf{r}' . For unstrained graphene, $\delta'_n = \delta_n$, where

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

The operators $c_{\mathbf{r}'}^\dagger$ and $c_{\mathbf{r}'+\delta'_n}$ correspond to creating and annihilating electrons on lattice sites. The hopping integral $t_{\mathbf{r}', n}$ depends upon strain, which induces bond length changes that increase or decrease the overlap between wave functions. Such variation with the distance can be calculated from [25,26] $t_{\mathbf{r}', n} = t_0 \exp[-\beta|\delta'_n|/a - 1]$, where $\beta \approx 3$, $t_0 \approx 2.7 \text{ eV}$ corresponds to nonstrained pristine graphene, and a is the bond length, which will be taken as $a = 1$ in what follows.

For strain in one direction, we can map exactly the Hamiltonian into an effective one dimensional system as the nanoribbon is made from cells of four nonequivalent atoms [27] with coordinates $\mathbf{r}' = (x, y_s^{(m)})$, where $s = 1, 2, 3, 4$ and m denotes the number of the cell, as sketched out in Fig. 1. For graphene without strain, the positions in the y direction are given by $y_1^{(m)} = 3m$, $y_2^{(m)} = 3m + 1/2$, $y_3^{(m)} = 3m + 3/2$, and $y_4^{(m)} = 3m + 2$. On each of these sites, a strain field $u(y)$ is applied, resulting in new positions $y_s'^{(m)} = y_s^{(m)} + u_s^{(m)}$ where $u_s^{(m)}$ is a short hand notation for $u(y_s^{(m)})$. For uniaxial strain, the symmetry along the nonstrained x direction is not broken. Thus the solution of the Schrödinger equation $H\Psi(\mathbf{r}') = E\Psi(\mathbf{r}')$ for the energy E has the form $\Psi(\mathbf{r}') = \exp(ik_x x)\psi_s(m)$, where k_x is the wave vector in x direction and $\psi_s(m)$ is only a function of $y_s'^{(m)}$, where s and m label the sites along the zigzag path in the vertical direction, as indicated in Fig. 1. Taking into account that for each bond that cross the dotted lines in Fig. 1, we need to add a phase $\exp(\pm ik_x \sqrt{3}/2)$ for the wave function, it is easy

*naumis@fisica.unam.mx

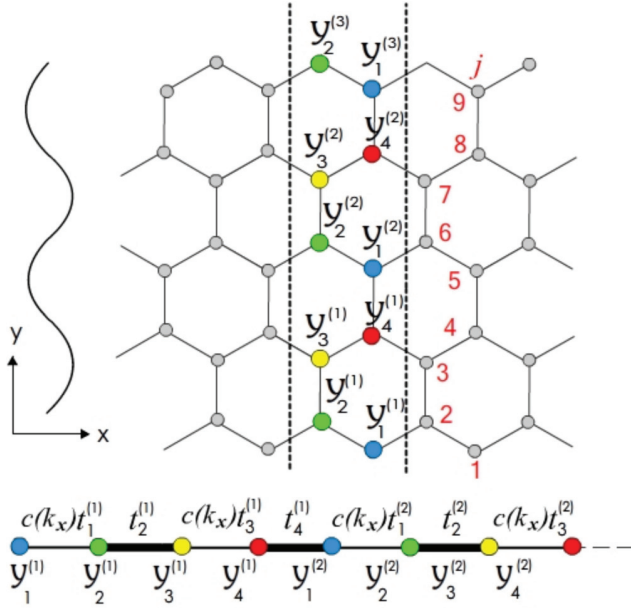


FIG. 1. (Color online) Mapping of zigzag strained graphene into a chain. The directions x and y are defined at the left. The strain in the y direction is sketched out using a wavy curve, while the boundaries of the unitary cell in the x direction are shown with dots. Inside the cell, four kinds of inequivalent sites appear (shown in different colors), denoted by $y_s^{(m)}$. The effective Hamiltonian of the zigzag path in the y direction that joins sites $y_s^{(m)}$ can be mapped into the chain that appears below, where the label j corresponds to the site along the zigzag path as indicated. For the special momenta $k_x = \pi/\sqrt{3}$, the model breaks down into dimers, represented by bold links in the chain.

to obtain the following Schrödinger equation,

$$\begin{aligned} E\psi_1(m) &= c(k_x)t_1^{(m)}\psi_2(m) + t_4^{(m-1)}\psi_4(m-1), \\ E\psi_2(m) &= t_2^{(m)}\psi_3(m) + c(k_x)t_1^{(m)}\psi_1(m), \\ E\psi_3(m) &= c(k_x)t_3^{(m)}\psi_4(m) + t_2^{(m)}\psi_2(m), \\ E\psi_4(m) &= t_4^{(m)}\psi_1(m+1) + c(k_x)t_3^{(m)}\psi_3(m), \end{aligned} \quad (3)$$

where $c(k_x) = 2 \cos(\sqrt{3}k_x/2)$ and $t_s^{(m)} = t_0 \exp[-\beta(u_{s+1}^{(m)} - u_s^{(m)})\delta_{s+1,s}^y]$. Here, $\delta_{s+1,s}^y$ denotes the y components of each of the three vectors $\delta_1, \delta_2, \delta_3$ that join sites with y coordinates $y_s^{(m)}$ and $y_{s+1}^{(m)}$ for unstrained graphene. In this formula, one needs to apply the conditions $y_5^{(m)} = y_1^{(m+1)}$ and $y_0^{(m)} = y_4^{(m-1)}$ at the boundary of each cell. Furthermore, the sequence of $y_s^{(m)}$ can be written as $y(j) = \{3j + [1 - (-1)^j/2]\}/4$, where j is an integer that labels the site number along the zigzag path in the y axis, given by $j = 4(m-1) + s$. Finally, one can write a Hamiltonian $H(k_x)$ without any reference to cells of four sites,

$$H(k_x) = \sum_j [t_{2j}c_{2j+1}^\dagger c_{2j} + c(k_x)t_{2j+1}c_{2j+2}^\dagger c_{2j+1}] \quad (4)$$

with $t_{[4(m-1)+s]} = t_s^{(m)}$. This gives

$$t_j = t_0 \exp\left[-\beta \frac{3 + (-1)^{j+1}}{4} (u_{j+1} - u_j)\right], \quad (5)$$

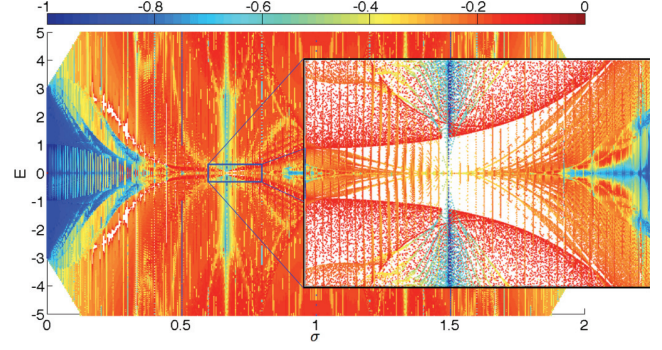


FIG. 2. (Color online) Spectrum as a function of σ for $\lambda = 2$ and $\phi = (4/3)\pi\sigma$ considering the exponential dependence of $t_{r',n}$, obtained by solving the Schrödinger's equation for a system of 200 atoms, using 300 grid points for sampling k_x and with periodic boundary conditions. The inset presents a blow up near zero energy. The different colors represent the localization participation ratio $\alpha(E)$.

where it is understood that u_j is just the displacement of the j th atom along the vertical zigzag path, i.e., $u_j \equiv u_s^{(m)}$. Now $H(k_x)$ describes a chain for any arbitrary uniaxial strain, as indicated in Fig. 1.

The exact mapping can serve as a test for approximate theories of strain in graphene. Consider, for example, an oscillating strain $u(y) = (2/3)(\lambda/\beta) \cos[(8\pi/3)\sigma(y - 1/2) + \phi]$ of the type expected when graphene grows on top of a material with a different lattice [10].

Figure 2 shows the complex spectrum of H as a function of σ , revealing a behavior that is akin to the Hofstadter butterfly that appears in the Harper model [28]. The most surprising result is the appearance of gaps around the Fermi level $E = 0$ for some values of σ . We can get a better understanding by using a linear approximation for $t_{r',n}$, assuming a small strain as usual in straintronics. Under such approximation, Eq. (5) becomes

$$\frac{t_j}{t_0} = 1 + \lambda\xi(j+1) \sin(\pi\sigma\xi(j)) \sin(2\pi\sigma j + \phi), \quad (6)$$

where $\xi(j) = 1 + [(-1)^j/3]$.

The resulting Hamiltonian describes one-dimensional quasicrystals for irrational σ , and modulated crystals for rational σ . Although the model resembles an off-diagonal Harper model [29], there is an important extra modulation provided by $\xi(j+1) \sin(\pi\sigma\xi(j))$. In Fig. 3, we present the resulting bands as a function of k_x and the corresponding density of states (DOS) for $\sigma = 0$ (pure graphene), $3\tau/4$, and $3/4$, where τ is the golden ratio $\tau = (\sqrt{5} - 1)/2$. Several interesting features are observed. The first is the disappearance of the Dirac cone for cases (c) and (e), observed around $E = 0$ for pure graphene. In case (c), degenerate states appear at $E = 0$ and the DOS is spiky. On the other hand, in case (f) the DOS is smooth. Only the Van Hove singularities observed for $E = \pm 1$ in pure graphene move and split in two. It is also interesting the behavior of the spectrum as a function of λ for a given σ . In Figs. 4(a) and 4(b), we present the cases $\sigma = 3\tau/4$ and $\sigma = 3/4$. For $\sigma = 3/4$, a gap opens above a certain critical

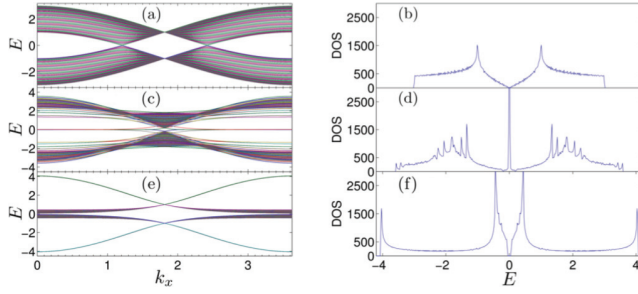


FIG. 3. (Color online) Band structure (left column) and density of states (right column) using $\phi = (4/3)\pi\sigma$ and $\lambda = 2$ for, (a) and (b) unstrained graphene lattice, (c) and (d) strained graphene with $\sigma \approx 3\tau/4$, (e) and (f) strained graphene with $\sigma = 3/4$. Spikes appear for cases (c) and (d), while a gap is seen in (e) and (f) at $E = 0$. Observe in (e) and (f) how the DOS is similar to linear chains perturbed by a small interaction.

λ_C , while for $\sigma = 3\tau/4$, no gaps are seen. Let us explain this rich behavior.

An analysis of Fig. 3(e) suggests that for $\sigma = 3/4$, the behavior is akin to a system of two disconnected chains. Such analysis is confirmed by evaluating Eq. (5) using $\sigma = 3/4$. In this particular case, the strain has the same period as the four site cells, thus $t_s^{(m)}$ turns out to be independent of m , and $t_s^{(m)} = 1 - 4(\lambda/3)\sin(3\pi s/2)$. The corresponding band edges are given by a matrix of 4×4 whose solutions, in terms of the parameters λ and k_x , are $E(\lambda, k_x) = \pm[\sqrt{1 + (8\lambda/9)^2 \cos^2(\sqrt{3}k_x/2)} \pm 2\cos(\sqrt{3}k_x/2)]$. A gap opens when $\lambda > \lambda_C = 9\sqrt{3}/8$. For $\lambda = \lambda_M = 9/4$, the system behaves as two disconnected strips of triangular cells, explaining the observed spectrum of Fig. 3(e). The gap (Δ) goes as $\Delta \propto (\lambda - \lambda_C)$ as confirmed by Fig. 4(b).

Figures 3(c) and 4(a) are even more interesting. Here the strain is incommensurate with the four site cell period. The system is thus quasiperiodic. As is well known, perturbation

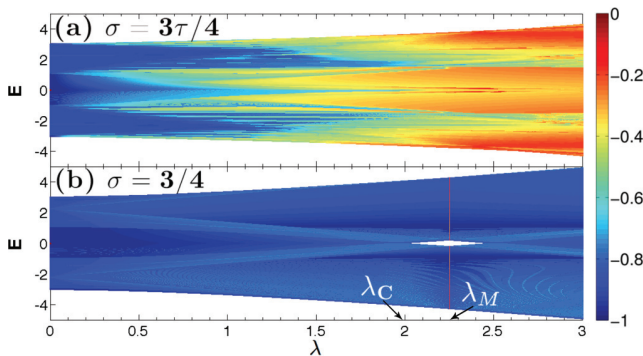


FIG. 4. (Color online) Energy spectrum of graphene under uniaxial sinusoidal strain in the linear approximation as a function of λ for (a) $\sigma = (3\tau/4)$ and (b) $\sigma = 3/4$. In (b), a gap opens for $\lambda > \lambda_C = 9\sqrt{3}/8$, while for $\lambda = 9/4$ the system breaks down into disconnected strips of triangular cells. The colors represent the localization participation ratio $\alpha(E)$. Notice the transition at $\lambda = \lambda_M$. The phase was taken as $\phi = (4/3)\pi\sigma$, and periodic boundary conditions were used.

theory can not be used at any order, since the problem is akin to the small divisor problem due to the dense appearance of diffraction peaks in reciprocal space [30]. This fact is important since if a Fourier expansion of the operator $c_{r'}$ is performed as $c_{r'} = \sum_{\mathbf{k}} \exp[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r}))] c_{\mathbf{k}}$, where \mathbf{k} is a reciprocal vector, then one needs to consider a dense distribution [30,31] in $\sum_{\mathbf{k}} \exp[\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})]$ for incommensurate cases. This explains the spiky DOS, since for each diffraction spot, a singularity appears [31,32]. To underline this, let us work out a particular example.

For the value $k_x = \pi/\sqrt{3}$, we have that $c(k_x) = 0$. This is valid for any λ or σ . The corresponding Hamiltonian $H(k_x = \pi/\sqrt{3})$ given by Eq. (4) becomes just a model for disconnected dimers, represented in the chain of Fig. 1 as bold lines. The eigenvalues are obtained from an effective 2×2 matrix, from where $E(k_x = \pi/\sqrt{3}) = \pm t_{2l}$, with l an integer. Using Eq. (6), the eigenvalues are $E(k_x = \pi/\sqrt{3}) = \pm[1 + (2/3)\lambda \sin(4\pi\sigma/3) \sin(4\pi\sigma l + \phi)]$. In the case of unstrained graphene, $E(k_x = \pi/\sqrt{3}) = \pm 1$. These two values correspond to the highly degenerate peaks observed in the DOS of Fig. 3(b). Each peak has a degeneracy $N/2$, where N is the number of atoms in the zigzag path. These peaks are associated with a Van Hove singularity, since standing waves due to diffraction appear [31–33]. For $\sigma = 3/4$, $E(k_x = \pi/\sqrt{3}) = \pm 1$. The degeneracy remains, as seen in Fig. 3(e), although it does not produce peaks because all other states are also highly degenerate. However, for irrational σ , the factor $\sin(4\pi\sigma l + \phi)$ behaves as a pseudorandom number generator which fills in a dense way the interval [30] $[-1, 1]$. The degeneracy is thus lifted. The spectral type is pure point and contained in the intervals $[-1 - 2\lambda/3, -1 + 2\lambda/3]$ and $[1 - 2\lambda/3, 1 + 2\lambda/3]$, leading to a gap of size $4\lambda/3$ if $\lambda < 3/2$. The splitting is evident at the middle of k_x axis in Fig. 3(c), and when compared with Figs. 3(a) and 3(e). What happens to the wave-function localization? For irrational σ , the eigenfunctions are localized in dimers on the y direction. Obviously, since all $E(k_x = \pi/\sqrt{3})$ are different, an infinite number of reciprocal vectors are needed to generate the corresponding wave functions. Thus, even in this simple case the usual perturbation theory breaks down. However, for rational σ , the eigenvalues are degenerate. Any linear combination of the wave function in dimers is a solution, leading to delocalized states around $k_x = \pi/\sqrt{3}$. Such behavior is revealed by calculating the normalized participation ratio, defined as [34]

$$\alpha(E) = \frac{\ln \sum_{j=1}^N |\psi(j)|^4}{\ln N}. \quad (7)$$

The factor $\alpha(E)$ is a measure of localization. In Figs. 2 and 4, the colors indicate the value of $\alpha(E)$. For Fig. 2, a fractal behavior reveals how localization depends on the number theory properties of σ . In Fig. 4(b), the case $\sigma = 3/4$ does not present appreciable changes, as expected from the previous discussion. Only at $\lambda = \lambda_M$ there is a localization transition as a consequence of the breaking into disconnected chains, leading to the vertical red line observed in Fig. 4(b). The case $\sigma = 3\tau/4$ shows the expected localization around $E = \pm 1$ as $\lambda \rightarrow \infty$.

Finally, it is worthwhile mentioning how some of the observed effects are related with the zigzag states reported

in graphene nanoribbons [35–37] and topological states [38]. In particular, the DOS in the irrational case resembles the case of narrow graphene nanoribbons [35]. The reason for this is simple. For irrational σ , there are sites j in which $t_j \approx 0$, since t_j mimics a random number generator. In such sites, the lattice is almost decoupled in the y direction, producing many effective nanoribbons of different widths. This leads to singularities that are strikingly similar to narrow nanoribbons, as observed in Fig. 3(d). In fact, a similar phenomena happens for rational σ and big λ . For example, if $\sigma = 3/4$ and $\lambda = \lambda_D$, t_j is zero at the end of the unitary one dimensional cell and we obtain many effective nanoribbons, but this time all with the same four atom width. In a similar way, the states at the Fermi energy can be explained in many different way: as zigzag states [35] due to an effective decoupling in nanoribbons, as an imbalance in the number of atoms in each bipartite lattice [33] or as strictly confined states [33]. These states have a topological nature, as we have verified by changing ϕ and using different boundary conditions.

In conclusion, we have provided an exact mapping into a one dimensional chain for any uniaxial strain in graphene. For a periodic strain, effective quasiperiodic or modulated crystals systems were obtained. Due to the dense nature of the reciprocal space, the spectrum and localization properties presented a fractal pattern. Gaps, singularities, and localized states were observed. These features can not be predicted by simple perturbation theory techniques. The quasiperiodic nature of the problem found here, suggests the paramount importance of disorder due to the intrinsic instability of such spectra [39–42] and the possibility of building equivalent superlattices [43]. In future work, we will study edge states, since they are expected to present a nesting of topological length scales, given by the Chern numbers, within a fractal pattern, as observed in the Harper and Fibonacci models [38].

This work was supported by DGAPA-PAPIIT IN-102513 and by DGTIC-NES center.

-
- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
- [2] A. K. Geim, *Science* **324**, 1530 (2009).
- [3] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [4] W. Lu, P. Soukiasian, and J. Boeckl, *MRS Bulletin* **37**, 1119 (2012).
- [5] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, *Science* **321**, 385 (2008).
- [6] V. M. Pereira, A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres, *Phys. Rev. B* **80**, 045401 (2009).
- [7] V. M. Pereira and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 046801 (2009).
- [8] F. Guinea, *Solid State Commun.* **152**, 1437 (2012).
- [9] D. Zhan, J. Yan, L. Lai, Z. Ni, L. Liu, and Z. Shen, *Adv. Mater.* **24**, 4055 (2012).
- [10] N. A. Vinogradov, A. A. Zakharov, V. Kocovski, J. Ruzs, K. A. Simonov, O. Eriksson, A. Mikkelsen, E. Lundgren, A. S. Vinogradov, N. Mårtensson, and A. B. Preobrajenski, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 026101 (2012).
- [11] A. L. Kitt, V. M. Pereira, A. K. Swan, and B. B. Goldberg, *Phys. Rev. B* **85**, 115432 (2012).
- [12] F. de Juan, J. L. Mañes, and M. A. H. Vozmediano, *Phys. Rev. B* **87**, 165131 (2013).
- [13] A. L. Kitt, V. M. Pereira, A. K. Swan, and B. B. Goldberg, *Phys. Rev. B* **87**, 159909(E) (2013).
- [14] J. V. Sloan, A. A. P. Sanjuan, Z. Wang, C. Horvath, and S. Barraza-Lopez, *Phys. Rev. B* **87**, 155436 (2013).
- [15] S. Barraza-Lopez, A. A. P. Sanjuan, Z. Wang, and M. Vanevi, *Solid State Commun.* **166**, 70 (2013).
- [16] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **88**, 085430 (2013).
- [17] G. Volovik and M. Zubkov, *Ann. Phys.* **340**, 352 (2014).
- [18] A. Luican, G. Li, A. Reina, J. Kong, R. R. Nair, K. S. Novoselov, A. K. Geim, and E. Y. Andrei, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 126802 (2011).
- [19] K. S. Novoselov, E. McCann, S. V. Morozov, V. I. Falko, M. I. Katsnelson, U. Zeitler, D. Jiang, F. Schedin, and A. K. Geim, *Nat. Phys.* **2**, 177 (2006).
- [20] L. A. Ponomarenko, R. V. Gorbachev, G. L. Yu, D. C. Elias, R. Jalil, A. A. Patel, A. Mishchenko, A. S. Mayorov, C. R. Woods, J. R. Wallbank, M. Mucha-Kruczynski, B. A. Piot, M. Potemski, I. V. Grigorieva, K. S. Novoselov, F. Guinea, V. I. Falko, and A. K. Geim, *Nature (London)* **497**, 594 (2013).
- [21] J. R. Wallbank, A. A. Patel, M. Mucha-Kruczynski, A. K. Geim, and V. I. Fal'ko, *Phys. Rev. B* **87**, 245408 (2013).
- [22] K. F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan, and T. F. Heinz, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 136805 (2010).
- [23] C. Ataca, H. ahin, and S. Ciraci, *J. Phys. Chem. C* **116**, 8983 (2012).
- [24] J. A. Reyes-Retana, G. G. Naumis, and F. Cervantes-Sodi, *J. Phys. Chem. C* **118**, 3295 (2014).
- [25] R. M. Ribeiro, V. M. Pereira, N. M. R. Peres, P. R. Briddon, and A. H. C. Neto, *New J. Phys.* **11**, 115002 (2009).
- [26] F. Guinea, M. I. Katsnelson, and A. K. Geim, *Nat. Phys.* **6**, 30 (2010).
- [27] A. Cresti, N. Nemeč, B. Biel, G. Niebler, F. Triozon, G. Cuniberti, and S. Roche, *Nano Research* **1**, 361 (2008).
- [28] D. R. Hofstadter, *Phys. Rev. B* **14**, 2239 (1976).
- [29] P. G. Harper, *Proc. Phys. Soc., London, Sect. A* **68**, 874 (1955).
- [30] D. DiVincenzo and P. Steinhardt, *Quasicrystals: The State of the Art*, Series on Directions in Condensed Matter Physics (World Scientific, Singapore, 1999).
- [31] G. G. Naumis and F. Lopez-Rodriguez, *Physica B* **403**, 1755 (2008).
- [32] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 6th ed. (Wiley, New York, 1986).
- [33] J. Barrios-Vargas and G. G. Naumis, *Solid State Commun.* **162**, 23 (2013).
- [34] G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **76**, 153403 (2007).
- [35] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **54**, 17954 (1996).

- [36] W. Yao, S. A. Yang, and Q. Niu, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 096801 (2009).
- [37] M. Ijäs, M. Ervasti, A. Uppstu, P. Liljeroth, J. van der Lit, I. Swart, and A. Harju, *Phys. Rev. B* **88**, 075429 (2013).
- [38] I. I. Satija and G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **88**, 054204 (2013).
- [39] G. G. Naumis and J. L. Aragón, *Phys. Rev. B* **54**, 15079 (1996).
- [40] G. G. Naumis and J. Aragn, *Phys. Lett. A* **244**, 133 (1998).
- [41] G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **71**, 144204 (2005).
- [42] J. C. López, G. Naumis, and J. L. Aragón, *Phys. Rev. B* **48**, 12459 (1993).
- [43] R. Nava, J. Tagüeña-Martínez, J. A. del Río, and G. G. Naumis, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 155901 (2009).

Artículo B

Spectral butterfly, mixed Dirac-Schrödinger fermion behavior,
and topological states in armchair uniaxial strained graphene

Pedro Roman-Taboada, G. G. Naumis

El artículo ha sido publicado en
Physical Review B Vol. 90, pp. 195435, 2014.

The layout has been revised.

Spectral butterfly, mixed Dirac-Schrödinger fermion behavior, and topological states in armchair uniaxial strained graphene

Pedro Roman-Taboada* and Gerardo G. Naumis

Departamento de Física-Química, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, 01000 México, Distrito Federal, Mexico

(Received 9 September 2014; revised manuscript received 30 October 2014; published 21 November 2014)

An exact mapping of the tight-binding Hamiltonian for a graphene nanoribbon under any armchair uniaxial strain into an effective one-dimensional system is presented. As an application, for a periodic modulation we have found a gap opening at the Fermi level and a complex fractal spectrum, akin to the Hofstadter butterfly resulting from the Harper model. The latter can be explained by the commensurability or incommensurability nature of the resulting effective potential. When compared with the zig-zag uniaxial periodic strain, the spectrum shows much bigger gaps, although in general the states have a more extended nature. For a special critical value of the strain amplitude and wavelength, a gap is open. At this critical point, the electrons behave as relativistic Dirac fermions in one direction, while, in the other direction, a nonrelativistic Schrödinger behavior is observed. Also, some topological states were observed which have the particularity of not being completely edge states since they present some amplitude in the bulk. However, these are edge states of the effective system due to a reduced dimensionality through decoupling. These states also present the fractal Chern beating observed recently in quasiperiodic systems.

DOI: [10.1103/PhysRevB.90.195435](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.195435)

PACS number(s): 73.22.Pr, 71.23.Ft, 03.65.Vf

I. INTRODUCTION

Graphene is an amazing one-atom-thick material. Its remarkable properties include high mobility, anomalous Hall quantum effect, Klein tunneling, lack of backscattering, etc. [1]. Moreover, graphene possesses excellent mechanical properties, such as, for example, the largest known elastic response interval (up to 25% of the lattice parameter [2]). The importance of this stems from the fact that it is possible to modify the electronic properties of graphene using elastic deformations, leading to a new field called “straintronics” [3–6]. For example, strain can modify electron-phonon coupling and even superconductivity [7]. In the literature, several approaches are used [5,8,9]. The most common one is to combine a tight-binding Hamiltonian with linear elasticity theory [8,10–12]. Under this approach, high pseudomagnetic fields appear, although assuming that the Dirac cone is not significantly modified [13]. However, for certain conditions that occur experimentally, like in graphene grown on top of a crystal [14] or rotated crystals [15], a gap can be opened at the Fermi level [16]. Such gaps are not obtained under the physical limit considered in the pseudomagnetic field approach, although it has a paramount importance for technical applications. Using other approaches, it has been shown that the induced gap opening depends strongly upon the direction of the strain [3] and requires values as large as 23%.

In a previous publication [16], we found a general method to map any zig-zag uniaxial strain into a one-dimensional effective system. Such a map opened the possibility to study strain from a new perspective. For example, we have proved that, in certain circumstances, periodic uniaxial strain produces a quasiperiodic behavior, due to the incommensurability of the effective resulting potential [16]. This results in a kind of modified Harper model [17]. The original Harper model leads

to the Hofstadter butterfly [18], which arises in the problem of an electron in a lattice with an applied uniform magnetic field. At the same time, these kinds of rough ideas were experimentally confirmed for graphene on top of hexagonal boron nitride as the rotational angle between the two hexagonal lattices was changed [15].

Unfortunately, in our previous work [16] we found that the gap sizes were very small and required strain amplitudes as large as 20% of the interatomic distance. This was a little bit disappointing from the technological point of view, as well as for studying the topological properties [19]. Since it is known that graphene under uniaxial uniform armchair strain presents a bigger gap opening at the Fermi level than zig-zag graphene [3], we decided to investigate the effects of a different kind of strain. As we will see throughout this paper, we found that it is possible to generate much bigger gaps using graphene nanoribbons under uniaxial armchair periodic elastic strain. Moreover, during this study we found an interesting effect at a critical point where a gap is open. At this point, the electrons have a mixed behavior. In one direction, a relativistic Dirac dynamics is followed, while, in the other direction, a nonrelativistic Schrödinger behavior is seen; i.e., the Dirac cone has a distorted cross section. As we will see, this results from a decreasing of the effective dimensionality due to strain. In fact, such behavior was theoretically anticipated by tuning *ad hoc* the graphene parameters [20,21]. Although Montambaux and coworkers [21] found since 2009 that bond pattern changes can result in a Dirac-Schrödinger behavior, there was not available an experimental setup to produce such a pattern. Here we prove that, in fact, such a possibility can be realized with the most simple oscillating strain. Our paper shows that armchair strain is needed to produce a transition to the Dirac-Schrödinger behavior, which is not observable using the zig-zag case.

This also opens the way to study interesting topological properties of the resulting one-dimensional effective systems [19]. We would like to point out that many of the results

*peter89@fisica.unam.mx

presented in this paper are different from our previous work on zig-zag. In particular, the special kind of topological states found here are almost impossible to be observed in the zig-zag strain case because the gaps do not open or are very small for realistic values of strain.

Finally, it is important to discuss the possibility of having an experimental system with the proposed uniaxial strain. From this point of view, it is clear that in order to have such strain one needs to solve the elastic equations to derive the appropriate stress load. By using this kind of experimental setup, it can be difficult to get the proposed uniaxial strain, as we will discuss later on. A much better prospect is to grow graphene on top of another lattice, in which it has been demonstrated in some particular cases that the strain is uniaxial [14,22]. Other systems that are suitable to observe the proposed effects are artificially made graphene superlattices [23–25], in which strain can be designed at will.

II. MAPPING OF ARMCHAIR UNIAXIAL STRAIN INTO AN EFFECTIVE ONE-DIMENSIONAL SYSTEM

When graphene is loaded with external forces, a strain pattern results. The new positions of the carbon atoms in the strained graphene are given by

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

where $\mathbf{r} = (x, y)$ are the unstrained coordinates of the carbon atoms. Notice that a critical step is to find the specific form of external forces to produce such a strain pattern. Usually, this is found by inverting the elasticity Lamé equations [26]. In graphene, this inversion to find the force load pattern has been made in some cases, like in suspended graphene [27] or

to produce a uniform pseudomagnetic field [28,29]. Usually, such a step is not a trivial task. An alternative is to use the finite-size method implemented in several available software tools.

We start with an armchair graphene nanoribbon, as shown in Fig. 1, with a uniaxial strain that produces an armchair strain, and

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = (u_x(y), u_y(y)) \quad (2)$$

is the corresponding strain field, which here must depend only on y . Although our approach can be applied for a general strain of the form $\mathbf{u}(y) = (u_x(y), u_y(y))$, here, for the sake of simplicity, we will assume that $u_x(y) = 0$ in what follows.

Let us discuss briefly the possibility of building such strain experimentally, since there is a huge asymmetry in the types of strains that can be applied to graphene [30]: while the C–C bond length can be stretched by more than 20%, it is almost incompressible because it would always change bond angle instead of shrinking bond length by out-of-plane buckling. Therefore, it is extremely hard to apply compressive strain to graphene. However, there are several ways in which the proposed strain can be realized. First the proposed strain can be made without C–C compression if the lattice is already in a state of uniform expansion and then some bonds are further stretched. In that case, only the starting interatomic distances need to be changed and our results are basically renormalized. Second, even if we assume that there is buckling in the compressed C–C bond, the out-of-plane buckling can be modeled in a first approximation as a strain field [31]. Also, it has been proved that graphene grown over certain lattices has indeed uniaxial strain [22], and of course there is always

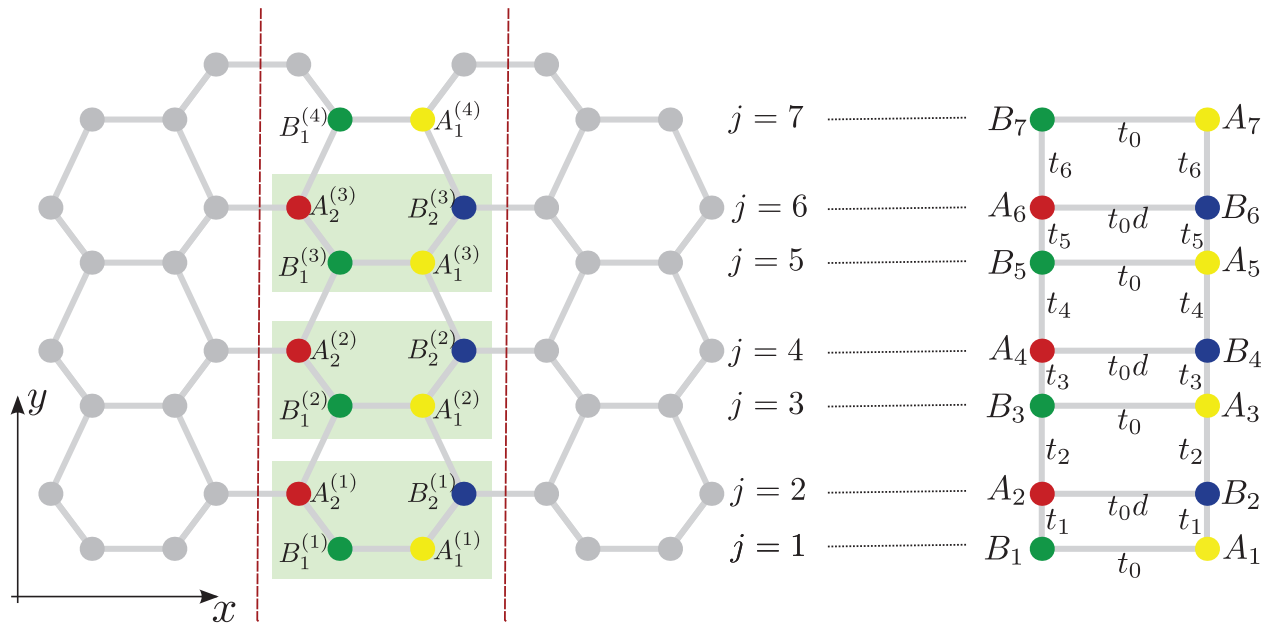


FIG. 1. (Color online) Mapping of armchair strained graphene into coupled chains. The strain in the y direction distorts the graphene hexagons, while the boundary of the unitary cell in the x direction is shown by red dotted lines. Inside of the cell, four inequivalent atoms appear (shown with different colors inside the rectangles) denoted by $A_1^{(m)}$, $A_2^{(m)}$, $B_1^{(m)}$, and $B_2^{(m)}$. The effective Hamiltonian of the armchair path in the y direction can be mapped into the coupled chains that appear to the right, where the label j corresponds to each step of the ladder along the y direction as indicated.

the possibility of building a graphene superlattice with the proposed strain.

To obtain the electronic properties, we use a one orbital next-nearest-neighbor tight-binding Hamiltonian in a honeycomb lattice, given by [32]

$$H = - \sum_{r',n} t_{r',r'+\delta'_n} c_{r'}^\dagger c_{r'+\delta'_n} + \text{H.c.}, \quad (3)$$

where the sum over r' is taken for all sites of the deformed lattice. The vectors δ'_n point to the three next-nearest neighbors of r' . For unstrained graphene $\delta'_n = \delta_n$, where

$$\delta_1 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}), \quad \delta_2 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \delta_3 = a(-1, 0), \quad (4)$$

and $c_{r'}$ and $c_{r'}^\dagger$ are the annihilation and creation operators of an electron at the lattice position r' .

In such a model, the hopping integral $t_{r',r'+\delta'_n}$ depends upon the strain, since the overlap between graphene orbitals is modified as the interatomic distances change. This effect can be described by [28,31]

$$t_{r',r'+\delta'_n} = t_0 \exp[-\beta(l_{r',r'+\delta'_n}/a - 1)], \quad (5)$$

where $l_{r',r'+\delta'_n}$ is the distance between two neighbors after strain is applied. Here $\beta \approx 3$, and $t_0 \approx 2.7$ eV corresponds to graphene without strain. The unstrained bond length is denoted by a , which will be taken as $a = 1$ in what follows.

For any uniaxial armchair strain, we will prove that the Hamiltonian given by Eq. (3) can be mapped into an effective Hamiltonian made from two coupled chains, as indicated in Fig. 1. Let us show such a construction.

In nonstrained armchair nanoribbons, the lattice can be thought of as made from a periodic cell stacking [33]. Each cell has four nonequivalent atoms, as seen in Fig. 1. When uniaxial strain is applied, each cell has different strain. Thus, we introduce an index m to label cells in the y direction. The nanoribbon is now made from cells of four nonequivalent atoms with coordinates $r'_i = (x_i^{(m)}, y_i^{(m)})$ where $m = 1, 2, 3, \dots, i = A_1, B_1, A_2, B_2$. Here, A corresponds to the sublattice A (B corresponds to sublattice B), as sketched in Fig. 1. For graphene without strain,

$$y_{A_1}^{(m)} = y_{B_1}^{(m)} = \sqrt{3}(m-1) \quad (6)$$

and

$$y_{A_2}^{(m)} = y_{B_2}^{(m)} = \sqrt{3}(m-1/2). \quad (7)$$

On each of these sites, a strain field $u_y(y)$ is applied, resulting in new positions:

$$y_i^{(m)} = y_i^{(m)} + u_i^{(m)}, \quad (8)$$

where $u_i^{(m)}$ is a shorthand notation for $u_y(y_i^{(m)})$.

Within each chain, the nearest-neighbor orbitals are coupled by the hopping parameter $t_{AB}^{(m)}$ and have vanishing onsite energies.

For uniaxial strain, the symmetry along the x direction is not broken. Thus, the solution of the Schrödinger equation $H\Psi(\mathbf{r}') = E\Psi(\mathbf{r}')$ for the energy E has the form $\Psi(\mathbf{r}') = \exp(ik_x x)\psi_i(m)$, where k_x is the wave vector in the x direction such that $k_x = 0, \dots, 2\pi$, $\psi_i(m)$ is the only function of $y_i^{(m)}$, where i and m label the atoms along the armchair

direction, as indicated in Fig. 1. If we order the basis as $A_1^{(1)}, B_2^{(1)}, \dots, A_1^{(N)}, B_2^{(N)}$ and $B_1^{(1)}, A_2^{(1)}, \dots, B_1^{(N)}, A_2^{(N)}$, we obtain the following Schrödinger equation:

$$\begin{aligned} E\psi_{A_1}(m) &= t_0\psi_{B_1}(m) + t_{A_1^{(m)}B_2^{(m)}}\psi_{B_2}(m) \\ &\quad + t_{A_1^{(m)}B_2^{(m-1)}}\psi_{B_2}(m-1), \\ E\psi_{B_2}(m) &= d(k_x)t_0\psi_{A_2}(m) + t_{B_2^{(m)}A_1^{(m)}}\psi_{A_1}(m) \\ &\quad + t_{A_1^{(m+1)}B_2^{(m)}}\psi_{A_1}(m+1), \\ E\psi_{A_2}(m) &= d^*(k_x)t_0\psi_{B_2}(m) \\ &\quad + t_{B_2^{(m+1)}A_2^{(m)}}\psi_{B_1}(m+1) + t_{A_2^{(m)}B_1^{(m)}}\psi_{B_1}(m), \\ E\psi_{B_1}(m) &= t_0\psi_{A_1}(m) \\ &\quad + t_{B_1^{(m)}A_2^{(m)}}\psi_{A_2}(m) + t_{B_1^{(m)}A_2^{(m-1)}}\psi_{A_2}(m-1), \end{aligned} \quad (9)$$

where $d(k_x) = \exp(ik_x a)$.

Now we label the atoms as in Fig. 1, i.e., A_1, A_2, \dots, A_{2N} and B_1, B_2, \dots, B_{2N} . The sequences $y_A^{(m)}$ and $y_B^{(m)}$ can be written as $y_A(j) = y_B(j) = y(j) = \sqrt{3}a(j-1)/2$ where $j = 1, 2, 3, \dots, n$ labels the site number along the armchair path in the y axis. Also, we observe that, due to the uniaxial nature of the strain, several symmetries are found in the bonds, $t_{A_1^{(m)}B_2^{(m)}} = t_{B_1^{(m)}A_2^{(m)}}$ as well as $t_{A_2^{(m)}B_1^{(m+1)}} = t_{B_2^{(m)}A_1^{(m+1)}}$, which allows us to reduce the resulting Schrödinger equation.

Finally, the Hamiltonian is mapped into a new one, $H(k_x)$, without any reference to cells of four sites:

$$\begin{aligned} H(k_x) &= \sum_j t_0 [d(k_x)a_j^\dagger b_{2j} + a_{2j+1}^\dagger b_{2j+1}] \\ &\quad + \sum_j t_j a_j^\dagger b_{j+1} + \text{H.c.}, \end{aligned} \quad (10)$$

where a_j, a_j^\dagger , and b_j, b_j^\dagger are the annihilation and creation operators in the lattices A and B , respectively. This effective Hamiltonian describes two modulated chains coupled by bonds of strength t_0 and $t_0 d(k_x)$, as sketched out in Fig. 1, where t_j are the values of the transfer integrals along the chains in the y direction. They are obtained as follows.

First, we calculate the length between atoms after strain is applied:

$$l_{r',r'+\delta'_n} = \|\delta_n + \mathbf{u}(\mathbf{r} + \delta_n) - \mathbf{u}(\mathbf{r})\|. \quad (11)$$

In the present case, two different kinds of bond lengths are obtained:

$$\begin{aligned} l_{A_1^{(m)}, B_2^{(m+s)}} \\ = \sqrt{(\delta_{s+2}^x)^2 + [\delta_{s+2}^y + u_y(y_{B_2^{(m+s)}}) - u_y(y_{A_1^{(m)}})]^2}, \end{aligned} \quad (12)$$

where $s = 0, -1$. δ_{s+2}^x and δ_{s+2}^y denote the x and y components of each of the vectors δ_1 and δ_2 .

Thus, for *odd* values of j ,

$$t_j = t_0 \exp[-\beta(l_{A_1^{(j+1)/2}, B_2^{(j+1)/2}} - 1)], \quad (13)$$

while, for *even* values of j ,

$$t_j = t_0 \exp[-\beta(l_{A_1^{(j/2)}, B_2^{(j/2+1)}} - 1)]. \quad (14)$$

In order to compare with other works, the case of small strain is interesting. Under such approximation, the hopping parameter between nearest neighbors along the chain is simplified a lot:

$$t_j \approx t_0 \exp[-\sqrt{3}\beta(u_{j+1} - u_j)/2], \quad (15)$$

where it is understood that u_j is the displacement of the j th atom along the vertical armchair path, i.e., $u_j = u_j^{(m)}$. However, in the literature the most common approach is to use a linear approximation for the hopping parameter, given by

$$t_j \approx t_0 \left[1 - \frac{\sqrt{3}\beta}{2}(u_{j+1} - u_j) \right]. \quad (16)$$

Summarizing, Eq. (10) is an effective one-dimensional Hamiltonian with effective hopping parameters given by Eqs. (13) and (14). For small strain amplitude, Eqs. (13) and (14) are replaced by their linearized version, Eq. (16). Such a set of equations maps any uniaxial armchair strain into a pair of coupled chains.

III. PERIODIC ARMCHAIR STRAIN

To understand the rich physics involved in strain, let us now concentrate on the case of periodic strain, which arises when graphene is grown on top of a substrate with a different lattice parameter [14]. The simplest choice is to consider a sinusoidal kind of strain, similar to the observed pattern in graphene grown over iron [14]. This imposed oscillation contains three parameters: wavelength (controlled by the parameter σ), amplitude (controlled by λ), and phase (controlled by ϕ). In order to simplify the resulting equations, we prefer to write the oscillating strain as

$$u_y(y) = \frac{\lambda}{\sqrt{3}\beta} \cos \left[\frac{4\pi\sigma}{\sqrt{3}}(y - \sqrt{3}/4) + \phi \right]. \quad (17)$$

Figure 2 shows the complex spectrum of H as a function of σ , obtained using fixed boundary conditions and by diagonalizing the resulting matrix for each value of k_x . The calculation presented here was made for a width of 160 atoms, and in Fig. 3 we present the resulting spectra for smaller sizes.

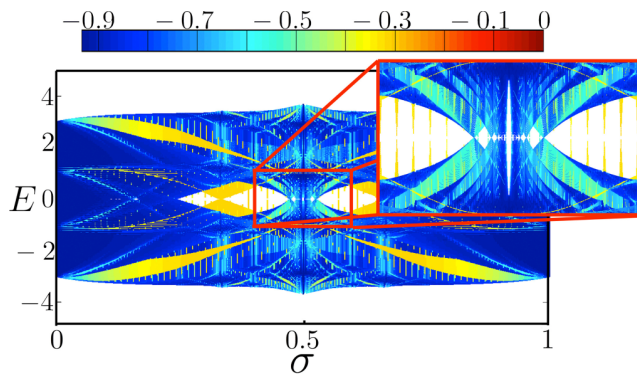


FIG. 2. (Color online) Spectrum as a function of σ for $\lambda = 1$ and $\phi = \pi\sigma$ obtained by solving the Schrödinger equation for a system of 160 atoms, using 250 grid points for sampling k_x and with fixed boundary conditions. The different colors represent the normalized localization participation ratio $\alpha(E)$. Inset: $\sigma = 1/2$ near $E = 0$.

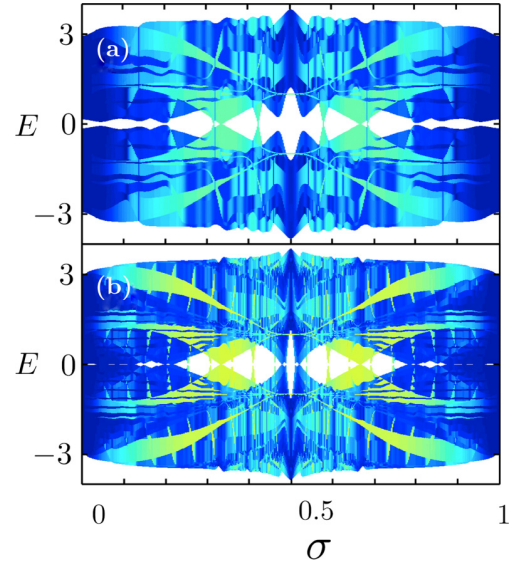


FIG. 3. (Color online) Spectrum as a function of σ for $\lambda = 1$ and $\phi = \pi\sigma$ obtained by solving the Schrödinger equation for a system of (a) 20 atoms and (b) 40 atoms, using 250 grid points for sampling k_x and with fixed boundary conditions. The different colors represent the normalized localization participation ratio $\alpha(E)$.

As expected, the gaps are amplified for smaller sizes due to quantum confinement effects [33,34], although there are fluctuations associated with the width, as happens with pure graphene nanoribbons [33]. Also, within our method it is possible to get bulk graphene by imposing periodic boundary conditions in the y direction, as will be done for the case $\sigma = 1/2$.

The most important feature of the resulting spectrum is its fractal nature, which is akin to the Hofstadter butterfly [18] which arises in the case of a lattice under a uniform magnetic field [17]. To illustrate this, we included color in Fig. 2 to code the localization properties of the wave functions. They are studied by calculating the normalized participation ratio, defined as

$$\alpha(E) = \frac{\ln \sum_{j=1}^N |\psi(j)|^4}{\ln N}. \quad (18)$$

The quantity $\alpha(E)$ estimates the occupied area by an electronic state [35]. For extended states, $\alpha(E) \rightarrow -1$ (blue color in the figure), while it tends to be bigger when localization is presented (red color in the figure). In the spectrum, it is clearly seen how different localizations coexist, making a very complex system in this respect.

To have a better understanding of the spectrum and its relationship with the Hofstadter butterfly, it is useful to consider the small strain case. Using Eq. (16), the hopping integrals along the chains are given by

$$t_j = t_0 [1 + \lambda \sin(\pi\sigma) \sin(2\pi\sigma j + \phi)]. \quad (19)$$

We recognize that Eq. (19) corresponds to the transfer integrals of the off-diagonal Harper model [17], that produces a Hofstadter butterfly [18]. The main difference here is that we have an off-diagonal Harper ladder.

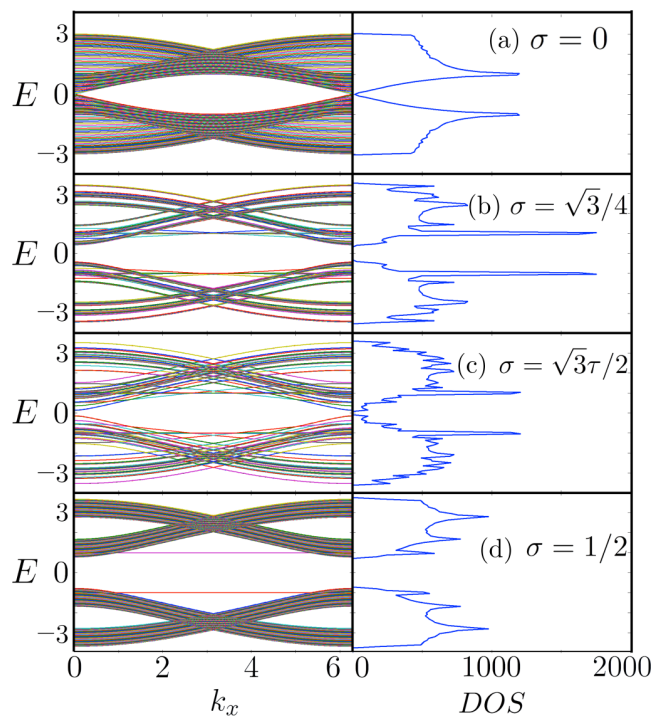


FIG. 4. (Color online) Band structure (left column) and density of states (right column) using $\phi = \pi\sigma$ and $\lambda = 1$ for (a) an unstrained graphene lattice, (b) strained graphene with $\sigma = \sqrt{3}/4$, (c) strained graphene with $\sigma = \sqrt{3}\tau/2$, and (d) strained graphene with $\sigma = 1/2$. Fixed boundary conditions were used in this plot.

As in the Harper model, the fractal nature of the spectrum is given by the number theory properties of σ . When σ is a rational number, say $\sigma = P/Q$, the effective one-dimensional potential has a superperiod Q . Thus states have a Bloch nature. For irrational σ , the potential is *quasiperiodic*. Although the Bloch theorem is still valid, it does not provide any reduction of the problem since an infinite number of reciprocal space components are needed to generate the wave function [18]. This can generate a cascade of gaps or critical eigenstates [36]. Interestingly, in the Harper model, the gaps have a topological nature [36–40]. Moreover, since the problem of finding the solutions to a quasiperiodic potential is akin to the small divisor problem in dynamical systems [41], perturbation theory has a very limited value. A sequence of rational approximates or renormalization techniques are much better strategies to follow [41–44].

It is also interesting to discuss the resulting bands as a function of k_x , using different values of σ at a fixed lambda. In Fig. 4 we present the bands with the corresponding density of states (DOS) to the right. For $\sigma = 0$ we recover the graphene case, where the Dirac cones projections are seen at $E = 0$, resulting in a linear DOS at the Fermi level. However, for the three selected cases, $\sigma = \sqrt{3}/4$, $\sigma = \sqrt{3}\tau/2$, and $\sigma = 1/2$, the Dirac cones are completely destroyed. The DOS for the case $\sigma = 1/2$ suggests that the problem is akin to two uncoupled linear chains. As we will see, these two chains are not the ones that are observed to the right in Fig. 1, since t_0 and t_0d are never zero. These effective chains are in fact running in the x direction, due to the fact that for some $j > 0$

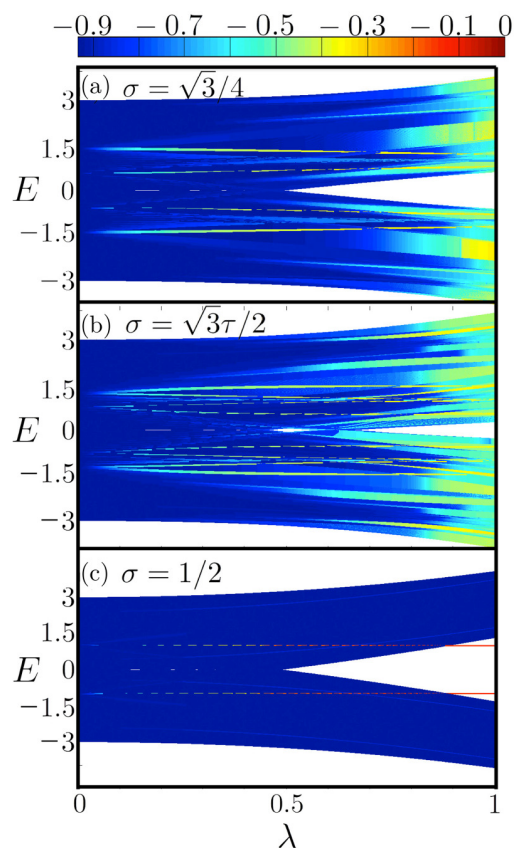


FIG. 5. (Color online) Energy spectrum of graphene as a function of λ for (a) $\sigma = \sqrt{3}/4$, (b) $\sigma = \sqrt{3}\tau/2$, and (c) $\sigma = 1/2$. For $\lambda > 1/2$ a gap at the Fermi level is opened. Fixed boundary conditions were used in this plot.

we can have $t_j \approx 0$ or even $t_j = 0$. Also, two edge states are observed at $E = \pm 1$. These states are the remaining of the original Van Hove singularities that appear at the same energy for unstrained graphene. The other cases for irrational σ are spiky, as was also observed and explained in our work of zig-zag strain [16]. This is due to the quasiperiodic behavior of the resulting potential for irrational σ , which results in many nearly uncoupled linear chains of different widths [16]. Thus, the DOSs are strikingly similar to those observed in narrow nanoribbons [45].

Consider now how the spectrum changes with λ for a given σ . Figure 5 presents such evolution for fixed boundary conditions. The main result here is the big gap opening at the Fermi level for the different σ as λ grows. When compared with the zig-zag case [16], is clear that armchair strain is much more efficient to produce gaps, especially at the Fermi level. Also, the case $\sigma = 1/2$ shows two edge states at $E = \pm 1$ which have a topological nature, as will be discussed in a special section.

IV. HALF-FILLING CASE $\sigma = 1/2$: MIXING DIRAC AND SCHRÖDINGER FERMIONS

Of particular interest is the case $\sigma = 1/2$, which for topological insulators is associated with half filling of the bands. For this case, the main interest is to know if a gap

is open or not. We start by noting that the hopping parameter can be written, using Eq. (19), as

$$t_j = 1 + (-1)^j \lambda. \quad (20)$$

This results in a staggered ladder in which the unitary cell contains only four nonequivalent atoms. As a result, the effective Hamiltonian can be further reduced using the symmetry in the y axis. For that end, the wave function can be written as

$$\Psi(\mathbf{r}') = \exp(ik_x x) \exp(ik_y y) \psi_i(j), \quad (21)$$

where now $j = 1, 2$. The corresponding spectrum is found by looking at the eigenvalues of the 4×4 effective matrix Hamiltonian, whose solutions, in terms of the parameters λ , k_x , and k_y , are given by

$$E_{\pm, \pm} = \pm \sqrt{\mp 2\sqrt{-(1 + \cos k_x)g(\lambda, k_y)} \mp [-1 - 2g(\lambda, k_y)]}, \quad (22)$$

where

$$g(\lambda, k_y) = -1 - \lambda^2 + (\lambda^2 - 1) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y}{2}\right). \quad (23)$$

The gap size Δ can be found by minimizing the square of the energy in Eq. (22), since the bands are symmetric around $E = 0$. The momentums that produce a minimum are $k_x = 2n\pi$ and $k_y = 2\pi(2n + 1)/\sqrt{3}$, where $n = 0, 1, 2, \dots, n$. The resulting gap is given by

$$\Delta = 4\left(\lambda - \frac{1}{2}\right) \quad (24)$$

and grows linearly with λ . This gap opening can be confirmed in Fig. 5. Notice, however, that the linear behavior is seen only near $\lambda = 1/2$, mainly because Fig. 5 was made for the nonlinearized model.

Furthermore, at the critical point $\lambda = \lambda_c = 1/2$ in which the spectrum changes from nongapped to gapped, we obtained a very interesting behavior. In Fig. 6, we plot the dispersion relationship $E_{\pm, \pm}$ as a function of k_x and k_y . As one can see, at the Fermi level there is a kind of Dirac point at $\mathbf{K} = (0, 2\pi(2n + 1)/\sqrt{3})$. However, it is not a cone. Instead, in the k_x direction the behavior is linear, i.e., of the Dirac type, while in the k_y direction it behaves in a parabolic fashion; i.e., the fermions follow the usual Schrödinger behavior. For $\lambda = \lambda_c$, and near the Dirac point, one can confirm such behavior by expanding Eq. (22) in series. In the k_x direction [$k_y = 2\pi(2n + 1)/\sqrt{3}$] we find the Dirac behavior,

$$E_{\pm, \pm} = \pm \frac{k_x}{2}, \quad (25)$$

while in the k_y direction ($k_x = 0$) we find a Schrödinger behavior:

$$E_{\pm, \pm} = \pm \frac{9}{32} \left[k_y - \frac{2\pi}{\sqrt{3}}(2n + 1) \right]^2. \quad (26)$$

Thus, this highlights the paramount importance of the particular half-filling and half-amplitude $\sigma = \lambda = 1/2$ critical point, in which the electron has a mixed Dirac and Schrödinger fermion dynamics, as seen in Fig. 6. The reason for this transition can be understood by looking at the limiting cases. For $\lambda = 0$, the system is unstrained graphene in which

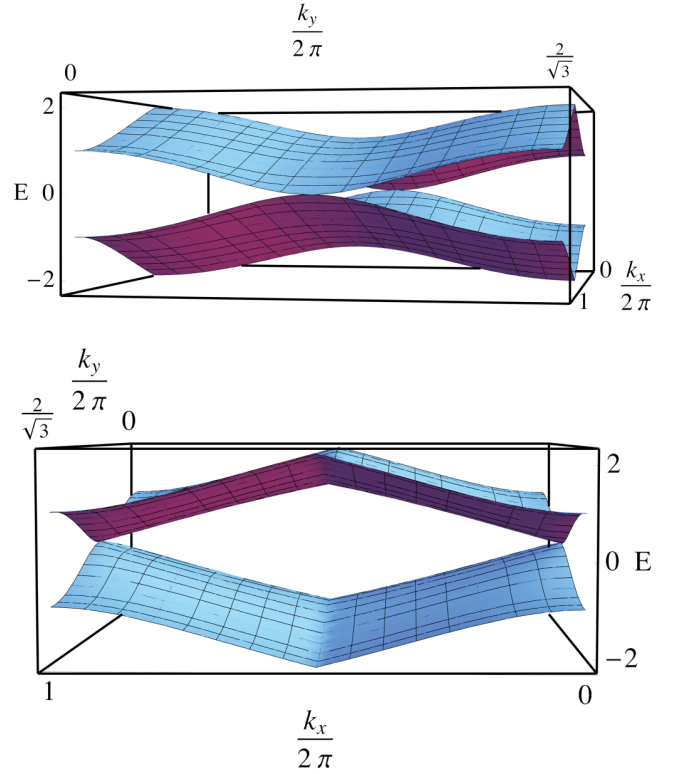


FIG. 6. (Color online) Different perspectives of the energy surface as a function of k_x and k_y for $\lambda = 1/2$ and $\sigma = 1/2$, using a linearized version of t_j . Notice how the electron has a mixed Schrödinger parabolic behavior with a Dirac linear fermion behavior at the Fermi level corresponding to $E = 0$.

electrons behave as Dirac fermions. At $\lambda = 1$, $t_j = 0$ for j odd, resulting in a decoupled system in the y direction. The system is thus made of two-atom-width nanoribbons spanning the x direction. In this case, the particles follow a chainlike behavior, i.e., of the Schrödinger type. As λ decreases, the parallel chains have a small interaction, as is suggested by the DOSs that appear in Fig. 4(d), which corresponds to two linear chains. Thus, the critical point separates two regions of different effective dimensionality. One is mainly two dimensional while in the other the propagation is nearly unidimensional. From a different point of view, this transition is due to the merging of Dirac cones, as was suggested in previous works by tuning *ad hoc* the transfer integrals [20,21]. In Fig. 7, we present three stages of the dispersion relationship evolution near the critical point. Below λ_c , two Dirac cones are seen, which are merged at $\lambda = \lambda_c$. Then a gap is open for $\lambda > \lambda_c$. Notice that the mixing of Dirac-Schrödinger dynamics is not observable using the zig-zag case, since the effective chain never has only two kinds of bonds [16].

V. TOPOLOGICAL STATES

As was discussed previously, in Figs. 4(d) and 5(c), two flat bands are seen at $E = \pm 1$ when $\sigma = 1/2$. These two bands only appear when fixed boundary conditions are considered, since the energy dispersion for the bulk given by Eq. (22)

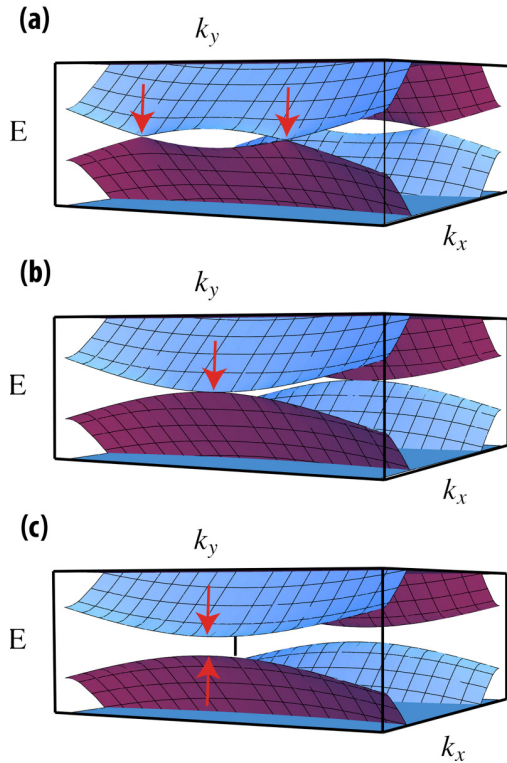


FIG. 7. (Color online) Evolution of the energy surface as a function of k_x and k_y for $\sigma = 1/2$ near the critical point. (a) $\lambda = 0.9\lambda_c$. (b) $\lambda = \lambda_c$. (c) $\lambda = 1.1\lambda_c$. In case (a), two Dirac cones are seen, which are merged in (b), and in (c) the cones disappear. The arrows indicate the position of the Fermi level.

does not present such states as seen in Fig. 8. Thus, these are edge states. It is well known that systems with band gaps and edge states can present nontrivial topological properties [46]. Here we decided to look at the behavior of the spectrum as a function of the phase in the potential, given by ϕ in Eq. (17).

In Fig. 8 we present the spectrum for the bulk and when fixed boundary conditions are included, as a function of the phase ϕ for $\sigma = 1/2$ and $\lambda = \lambda_c$. As we can see, the edge states present a nontrivial topological behavior, since they are absent in one of the gaps. We can track the behavior of the related states as seen in Fig. 8. For ϕ close to zero, the states are localized at the edges as expected, but surprisingly they also have amplitude near the center. However, this can be explained by observing that in this limit we almost have chain decoupling. Thus, these states are edge states of the effective one-dimensional system, which seems to be a very interesting phenomenon. Furthermore, observe how the amplitudes are interlaced at the center, due to the symmetry of the problem. As the phase moves, these states eventually merge with the band edges, near $\phi = \pi/2$, and present a nonlocalized nature. As shown in the figure, the wavefunction spatial pattern seems to be sinusoidal with a long-wave modulation, which suggests that the Chern beating effect, originally observed and explained in quasiperiodic systems [19], is also present here.

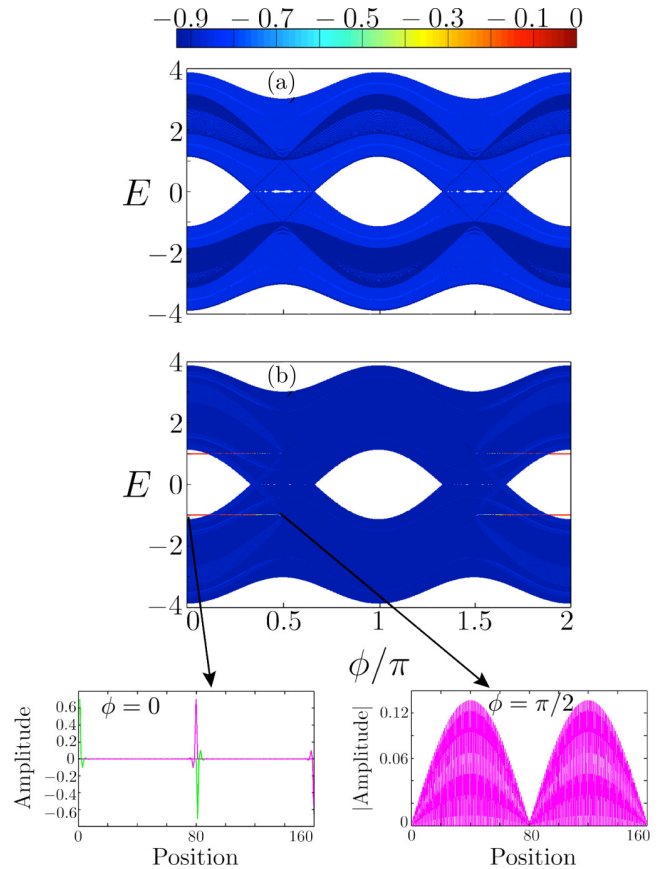


FIG. 8. (Color online) Upper panels show the energy spectrum with 160 sites with $\lambda = \lambda_c$ and $\sigma = 1/2$. (a) Energy spectrum using cyclic boundary conditions. (b) Energy spectrum using fixed boundary conditions. The colors represent the normalized localization participation ratio $\alpha(E)$. Two $E = \pm 1$ energy modes are localized on either one of the edges and on the middle of the chain in $0 \leq \phi < \pi/2$. For $\phi = \pi/2$ the localized energy modes become extended. The lower panel displays the eigenstates for $E = -1$ energy modes using $\phi = 0$ and $\pi/2$. Notice how the wave function is modulated with an envelope of bigger wavelength, a phenomena called Chern beating [19].

VI. CONCLUSIONS

In conclusion, we provided a general way to map any uniaxial armchair strain into an effective one-dimensional system. For the particular case of periodic strain, we obtained a spectrum akin to the Hofstadter butterfly. The armchair strain produces bigger gaps than the zigzag case. An analysis of the half-filling case for the periodic strain reveals a critical point for the opening of the gap. At this critical point, the fermions have a mixed behavior. In one direction they behave with a Dirac dynamics, while in the perpendicular one they follow a Schrödinger one. Such behavior arises as a consequence of a change in the effective dimensionality of the system. Also, we have observed some topological states due to strain. Interestingly, strain allows us to have some amplitude of the topological modes inside the bulk through a decoupling of the system. These states also present the phenomenon of Chern beating observed in other quasiperiodic systems [19]. This opens the avenue for a whole set of new phenomena that seems to be realizable from an experimental point of view.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank Indu Satija and Maurice Oliva-Leyva for enlightening discussions and a critical reading of the manuscript. This work was supported by the Dirección General de Asuntos del Personal Académico-Programa de Apoyo a Proyectos

de Investigación e Innovación Tecnológica (DGAPA-PAPIIT) IN-102513 project, and by the Dirección General de Cómputo y de Tecnologías de Información y Comunicación (DGTIC)-NES center. P.R.-T. acknowledges support from Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) (Mexico).

-
- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
- [2] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, *Science* **321**, 385 (2008).
- [3] V. M. Pereira, A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres, *Phys. Rev. B* **80**, 045401 (2009).
- [4] V. M. Pereira and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 046801 (2009).
- [5] F. Guinea, *Solid State Commun.* **152**, 1437 (2012).
- [6] D. Zhan, J. Yan, L. Lai, Z. Ni, L. Liu, and Z. Shen, *Advanced Materials* **24**, 4055 (2012).
- [7] C. Si, Z. Liu, W. Duan, and F. Liu, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 196802 (2013).
- [8] H. Suzuura and T. Ando, *Phys. Rev. B* **65**, 235412 (2002).
- [9] A. A. Pacheco Sanjuan, Z. Wang, H. Pour Imani, M. Vanević, and S. Barraza-Lopez, *Phys. Rev. B* **89**, 121403(R) (2014).
- [10] J. L. Mañes, *Phys. Rev. B* **76**, 045430 (2007).
- [11] A. F. Morpurgo and F. Guinea, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 196804 (2006).
- [12] M. Vozmediano, M. Katsnelson, and F. Guinea, *Physics Reports* **496**, 109 (2010).
- [13] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **88**, 085430 (2013).
- [14] N. A. Vinogradov, A. A. Zakharov, V. Kocevski, J. Ruzs, K. A. Simonov, O. Eriksson, A. Mikkelsen, E. Lundgren, A. S. Vinogradov, N. Mårtensson, and A. B. Preobrajenski, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 026101 (2012).
- [15] C. R. Woods, L. Britnell, A. Eckmann, R. S. Ma, J. C. Lu, H. M. Guo, X. Lin, G. L. Yu, Y. Cao, R. V. Gorbachev, A. V. Kretinin, J. Park, L. A. Ponomarenko, M. I. Katsnelson, Y. Gornostyrev, K. Watanabe, T. Taniguchi, C. Casiraghi, H. J. Gao, A. K. Geim, and K. S. Novoselov, *Nat. Phys.* **10**, 451 (2014).
- [16] G. G. Naumis and P. Roman-Taboada, *Phys. Rev. B* **89**, 241404 (2014).
- [17] P. G. Harper, *Proc. Phys. Soc. London, Sect. A* **68**, 874 (1955).
- [18] D. R. Hofstadter, *Phys. Rev. B* **14**, 2239 (1976).
- [19] I. I. Satija and G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **88**, 054204 (2013).
- [20] L.-K. Lim, J.-N. Fuchs, and G. Montambaux, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 175303 (2012).
- [21] G. Montambaux, F. Piéchon, J.-N. Fuchs, and M. O. Goerbig, *Phys. Rev. B* **80**, 153412 (2009).
- [22] G.-X. Ni, H.-Z. Yang, W. Ji, S.-J. Baeck, C.-T. Toh, J.-H. Ahn, V. M. Pereira, and B. Zylmaz, *Advanced Materials* **26**, 1081 (2014).
- [23] T. Uehlinger, G. Jotzu, M. Messer, D. Greif, W. Hofstetter, U. Bissbort, and T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 185307 (2013).
- [24] U. Kuhl, S. Barkhofen, T. Tudorovskiy, H.-J. Stöckmann, T. Hossain, L. de Forges de Parny, and F. Mortessagne, *Phys. Rev. B* **82**, 094308 (2010).
- [25] O. Peleg, G. Bartal, B. Freedman, O. Manela, M. Segev, and D. N. Christodoulides, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 103901 (2007).
- [26] A. Sommerfeld, *Mechanics of Deformable Bodies: Lectures on Theoretical Physics*, Lectures on Theoretical Physics (Academic, New York, 1950).
- [27] J. C. Meyer, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, T. J. Booth, and S. Roth, *Nature (London)* **446**, 60 (2007).
- [28] F. Guinea, M. I. Katsnelson, and A. K. Geim, *Nat. Phys.* **6**, 30 (2010).
- [29] T. Low and F. Guinea, *Nano Lett.* **10**, 3551 (2010).
- [30] Y. Zhang and F. Liu, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 241908 (2011).
- [31] R. M. Ribeiro, V. M. Pereira, N. M. R. Peres, P. R. Briddon, and A. H. C. Neto, *New Journal of Physics* **11**, 115002 (2009).
- [32] W. Lu, P. Soukiassian, and J. Boeckl, *MRS Bulletin* **37**, 1119 (2012).
- [33] A. Cresti, N. Nemeč, B. Biel, G. Niebler, F. Triozon, G. Cuniberti, and S. Roche, *Nano Research* **1**, 361 (2008).
- [34] G. G. Naumis, M. Terrones, H. Terrones, and L. M. Gaggero-Sager, *Appl. Phys. Lett.* **95**, 182104 (2009).
- [35] G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **76**, 153403 (2007).
- [36] G. G. Naumis and F. Lpez-Rodriguez, *Physica B: Condensed Matter* **403**, 1755 (2008).
- [37] S. Ganeshan, K. Sun, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 180403 (2013).
- [38] M. Verbin, O. Zilberberg, Y. E. Kraus, Y. Lahini, and Y. Silberberg, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 076403 (2013).
- [39] Y. E. Kraus and O. Zilberberg, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 116404 (2012).
- [40] L.-J. Lang, X. Cai, and S. Chen, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 220401 (2012).
- [41] D. DiVincenzo and P. Steinhardt, *Quasicrystals: The State of the Art, Series on Directions in Condensed Matter Physics* (World Scientific, Singapore, 1999).
- [42] G. G. Naumis and J. L. Aragón, *Phys. Rev. B* **54**, 15079 (1996).
- [43] G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **59**, 11315 (1999).
- [44] R. Nava, J. Taguea-Martnez, J. A. del Ro, and G. G. Naumis, *Journal of Physics: Condensed Matter* **21**, 155901 (2009).
- [45] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **54**, 17954 (1996).
- [46] X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).

Artículo C

Spectral butterfly and electronic localization in rippled-graphene nanoribbons: Mapping onto effective one-dimensional chains

Pedro Roman-Taboada, G. G. Naumis

El artículo ha sido publicado en
Physical Review B Vol. 92, pp. 035406, 2015.

The layout has been revised.

Spectral butterfly and electronic localization in rippled-graphene nanoribbons: Mapping onto effective one-dimensional chains

Pedro Roman-Taboada^{1,*} and Gerardo G. Naumis^{2,†}

¹*Departamento de Física-Química, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM),
Apartado Postal 20-364, 01000 México, Distrito Federal, Mexico*

²*School of Physics, Astronomy and Computational Sciences, George Mason University, Fairfax, Virginia 22030, USA*
(Received 23 April 2015; revised manuscript received 3 June 2015; published 6 July 2015)

We report an exact map into one-dimensional effective chains of the tight-binding Hamiltonian for electrons in armchair and zigzag graphene nanoribbons with any uniaxial ripple. This mapping is used for studying the effect of uniaxial periodic ripples, taking into account the relative orientation changes between π orbitals. Such effects are important for short-wavelength ripples, while for long-wave ones, the system behaves nearly as strained graphene. The spectrum has a complex nature, akin to the Hofstadter butterfly with a rich localization behavior. Gaps at the Fermi level and dispersionless bands were observed, as well. The complex features of the spectrum arise as a consequence of the quasiperiodic or periodic nature of the effective one-dimensional system. Some features of these systems can be understood by considering weakly coupled dimers. The eigenenergies of such dimers are highly degenerate, and the net effect of the ripple can be seen as a perturbation potential that splits the energy spectrum. Several particular cases were analytically solved to understand this feature.

DOI: [10.1103/PhysRevB.92.035406](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.035406)

PACS number(s): 73.22.Pr, 71.23.Ft

I. INTRODUCTION

Graphene, which is a two-dimensional (2D) crystal made from carbon, has incredible electronic, optical, and mechanical properties [1,2]. However, it is very difficult to grow perfectly flat graphene [3–6]. Instead, graphene presents corrugations and ripples that can improve or diminish its electronic conductivity [7–10]. Hence, the understanding of how corrugations and ripples modify the electronic properties of graphene is a very important issue. Furthermore, such knowledge can provide a way to tailor the electronic properties of graphene via mechanical deformation [11–13]. Even though the uniform and homogeneous strain has reached a level of good understanding [7,14,15], out-of-plane deformation effects are not well understood. Moreover, most of the available theories are limited to the case of low energies or long wavelengths, in which it is possible to write an effective Dirac equation with effective pseudomagnetic fields [16–18].

In a recent set of papers, we have shown that this picture can be modified for shorter wavelengths since a quasiperiodic fractal behavior, nontreatable under perturbation theory, can appear [19,20]. At the same time, an experimental observation of the effect has recently been made [21]. This behavior is not new in graphene; actually, this fractality has been extensively studied in graphene under magnetic fields within the Dirac approach [22–25]. However, a study of this behavior as a consequence of strain or corrugation using a tight-binding approach does not appear to have been made. The aim of this work is to understand how ripples modify the electronic properties of armchair (AGNs) and zigzag (ZGNs) graphene nanoribbons. To get such understanding, here we propose the study of uniaxial ripples using a tight-binding Hamiltonian.

Uniaxial ripples already show the expected effects in more general cases, and at the same time, it is possible to map the system into one-dimensional (1D) chains. This procedure is similar to that used for studying electrons in lattices under magnetic fields, in which it is possible to obtain the spectrum by studying the one-dimensional Harper equation [26,27]. Once this connection is established, we propose the study of the physical effects using uniaxial periodic ripples. As we will see, the energy spectrum has a fractal structure with gaps at the Fermi level. This highlights the importance of the rational or irrational nature of the ripple's wavelength. Furthermore, we are able to solve several cases analytically, leading to expressions for the bands as a function of the ripple's parameters: wavelength and amplitude.

The layout of this work is the following: In Sec. II, we discuss the details of mapping AGNs and ZGNs under any uniaxial ripple into effective 1D chains. In Sec. III, we study a particular case, a uniaxial periodic ripple, using the previous maps. The properties of the energy spectrum as a function of the frequency of the ripple, the band structure, and the density of states (DOS) are discussed, as well. Finally, in Sec. IV, our conclusions are presented.

II. MAPPING OF UNIAXIAL RIPPLED GRAPHENE INTO AN EFFECTIVE ONE-DIMENSIONAL SYSTEM

In this section, we will show how to reduce the study of uniaxial ripples in graphene to an effective one-dimensional system. We start with a graphene nanoribbon, as shown in Figs. 1 and 2, with a uniaxial deformation in the y direction due to a ripple in the graphene sheet. The new positions of carbon atoms in the rippled graphene are

$$\mathbf{r}' = (\mathbf{r}, z(\mathbf{r})), \quad (1)$$

where $\mathbf{r} = (x, y, 0)$ are the unrippled coordinates of carbon atoms, and $z(\mathbf{r})$ is the height variable in terms of the position \mathbf{r} . To obtain the electronic properties, we use a one-orbital next-nearest-neighbor tight-binding Hamiltonian in a honeycomb

*peter89@fisica.unam.mx

†On sabbatical leave from Departamento de Física-Química, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Apartado Postal 20-364, 01000 México, Distrito Federal, Mexico.

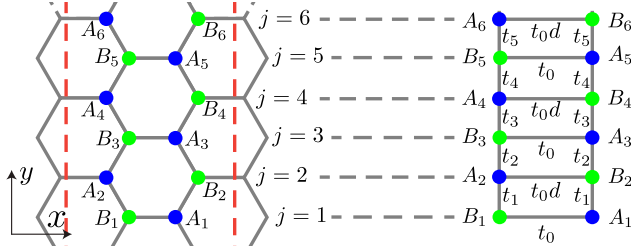


FIG. 1. (Color online) Primitive cell for AGNs (on the left between the red dotted lines) which is made for $2N$ atoms, i.e., N atoms of type A (blue solid circles) and N atoms of type B (green solid circles), we order the basis as $A_1, B_2, \dots, B_{N-1}, A_N, B_1, A_2, \dots, B_{N-1}, B_N$. We vary the height of each atom along the y direction. For this case the hopping parameter just depends upon the y component of the in-plane atom positions. The system is equivalent to the one-dimensional effective ladder shown at the right, where the label j corresponds to each ladder step in the y direction. t_j is the hopping integral for hopping from the atom A_j (B_j) to the atom B_{j+1} (A_{j+1}), and d is a coefficient that depends upon the momentum k_x .

lattice, given by [28]

$$H = - \sum_{\mathbf{r}', n} t_{\mathbf{r}', \mathbf{r}'+\delta'_n} c_{\mathbf{r}'}^\dagger c_{\mathbf{r}'+\delta'_n} + \text{H.c.}, \quad (2)$$

where the sum over \mathbf{r}' is taken for all sites of the deformed lattice. The vectors δ'_n point to the three next-nearest neighbors of \mathbf{r}' . For unstrained graphene $\delta'_n = \delta_n$ where

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

and $c_{\mathbf{r}'}^\dagger$ and $c_{\mathbf{r}'}$ are the creation and annihilation operators of an electron at the lattice position \mathbf{r}' . In this model, the hopping integral $t_{\mathbf{r}', \mathbf{r}'+\delta'_n}$ depends upon the strain, since the overlap between graphene orbitals is modified as the interatomic distances change. When corrugation is present, the π orbitals are no longer parallel. Let us denote by $\theta_{\mathbf{r}'}$ the angle which determines the relative orientation of a carbon atom in the

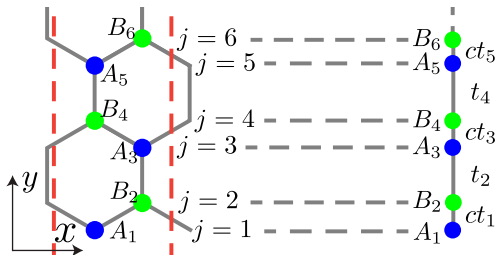


FIG. 2. (Color online) Primitive cell for ZGNs (to the left, delimited by two red dotted lines) made of N atoms ($N/2$ atoms of type A and $N/2$ atoms of type B). The basis is ordered as $A_1, B_2, \dots, A_{N-1}, B_N$. The height z of every atom is modified only in the y direction. Then the hopping parameter is no longer constant but depends upon the y component of the atom's positions. This system can be mapped into a one-dimensional effective chain (on the left) where j labels the site along the zigzag direction. t_j is the hopping parameter for hopping from the j th atom to the $(j+1)$ th atom, and c is a coefficient that depends on the momentum in the x direction.

position \mathbf{r}' in the graphene nanoribbon. This angle depends on the local curvature of the layer. The effect of the relative orientation change of the π orbitals and the interatomic distance changes are described by [29–31]

$$t_{\mathbf{r}', \mathbf{r}'+\delta'_n} = t_0 [1 + \alpha(1 - \mathbf{N}_{\mathbf{r}'} \cdot \mathbf{N}_{\mathbf{r}'+\delta'_n})] \times \exp[-\beta(l_{\mathbf{r}', \mathbf{r}'+\delta'_n}/a - 1)], \quad (4)$$

where $\mathbf{N}_{\mathbf{r}'}$ is the unit vector normal to the surface at the site \mathbf{r}' , given by

$$\mathbf{N}_{\mathbf{r}'} = \frac{\hat{z} - \nabla z}{\sqrt{1 + (\nabla z)^2}}, \quad (5)$$

and $\nabla = (\partial_x, \partial_y)$ is the 2D gradient operator while \hat{z} is the unit vector in the direction perpendicular to the plane. $l_{\mathbf{r}', \mathbf{r}'+\delta'_n}$ is the interatomic distance between two neighbor sites after a ripple is applied, and $\alpha \approx 0.4$ is a constant that accounts for the change of the relative orientation of the π orbitals. Here $\beta \approx 3.37$, and $t_0 \approx 2.7$ eV corresponds to graphene without strain. The unrippled bond length is denoted by a . For the purpose of this paper, it is natural to measure the distances in units of a , which is equivalent to setting $a = 1$. In other words, all the distances and lengths will be measured in units of a . It is important to remark that contributions from terms containing β are due to distance changes, while terms dependent on α account for angular changes of the orbital overlap. As we will see, β -dependent terms tend to shrink the energy spectrum whereas α -dependent terms tend to stretch it.

Now, for a uniaxial ripple the interatomic distances between carbon atoms can be written as

$$l_{\mathbf{r}', \mathbf{r}'+\delta'_n} = \|\delta_n + [z(y + \delta_n^{(y)}) - z(y)] \hat{z}\| = \sqrt{1 + [z(y + \delta_n^{(y)}) - z(y)]^2}. \quad (6)$$

Recently, we have shown that it is possible to map armchair and zigzag graphene nanoribbons under uniaxial strain onto an effective one-dimensional system [19,20]. In the next section, we extend these results for AGNs and ZGNs under uniaxial ripples.

Before entering the details of the maps and for comparison purposes with other works, it is important to remark that for small-amplitude and long-wavelength ripples, we have $(1 - \mathbf{N}_{\mathbf{r}'} \cdot \mathbf{N}_{\mathbf{r}'+\delta'_n}) \approx \theta_{\mathbf{r}', \mathbf{r}'+\delta'_n}^2/2$, where $\theta_{\mathbf{r}', \mathbf{r}'+\delta'_n}$ is the angle between π orbitals at the sites \mathbf{r}' and $\mathbf{r}'+\delta'_n$. In such a case, since $\alpha < \beta$ and the angle correction is quadratic, it follows that

$$t_{\mathbf{r}', \mathbf{r}'+\delta'_n} \approx t_0 \left[1 + \frac{\alpha}{2} \theta_{\mathbf{r}', \mathbf{r}'+\delta'_n}^2 \right] \exp[-\beta(l_{\mathbf{r}', \mathbf{r}'+\delta'_n} - 1)] \approx t_0 [1 - \beta(l_{\mathbf{r}', \mathbf{r}'+\delta'_n} - 1)]. \quad (7)$$

In this limit, the model resembles graphene nanoribbons under planar strain. As we will show, our general computations are consistent with this limit, providing a test for the method presented here.

A. Armchair graphene nanoribbon

When a uniaxial ripple in the y direction is applied, it is possible to describe the electronic properties of the AGN by an effective one-dimensional Hamiltonian. We start by labeling

the atom's positions as shown in Fig. 1, i.e., we order the basis as $A_1, B_2, A_3, \dots, A_{N-1}, B_N$ and $B_1, A_2, B_3, \dots, A_{N-1}, B_N$. Thus, the effective one-dimensional Hamiltonian can be written as [20]

$$H_{\text{AGN}}(k_x) = \sum_j t_0 [d(k_x) a_{2j}^\dagger b_{2j} + a_{2j+1}^\dagger b_{2j+1}] + \sum_j t_j^{\text{AGN}} a_j^\dagger b_{j+1} + \text{H.c.}, \quad (8)$$

where $d(k_x) = \exp(ik_x)$, a_j, a_j^\dagger , and b_j, b_j^\dagger are the annihilation and creation operators in the sublattices A and B in graphene, respectively. This effective Hamiltonian describes two modulated chains, as is shown in Fig. 1. t_j^{AGN} is the hopping parameter between the $j+1$ and j atoms in the y direction, given by

$$t_j^{\text{AGN}} = t_0 [1 + \alpha(1 - N_{j+1}^{\text{AGN}} \cdot N_j^{\text{AGN}})] \times \exp[-\beta(t_{j+1,j}^{\text{AGN}} - 1)], \quad (9)$$

where

$$t_{j+1,j}^{\text{AGN}} = \sqrt{1 + [z(y_{j+1}^{\text{AGN}}) - z(y_j^{\text{AGN}})]^2} \quad (10)$$

is the interatomic distance between the atoms in sites $j+1$ and j ,

$$y_j^{\text{AGN}} = y_A^{\text{AGN}}(j) = y_B^{\text{AGN}}(j) = \sqrt{3}(j-1)/2 \quad (11)$$

are the positions for atoms A and B , and $j = 1, 2, \dots, N$ labels the sites along the y direction for pristine graphene. Finally the unitary normal vector is $N_j^{\text{AGN}} = N(y_j^{\text{AGN}})$ defined as in Eq. (5).

B. Zigzag graphene nanoribbon

Similarly, when we apply a uniaxial ripple to a zigzag graphene nanoribbon, it is possible to map the system into a one-dimensional effective chain. If we label the basis as $A_1, B_2, \dots, A_{N-1}, B_N$, as shown in Fig. 2, the resulting Hamiltonian is [19]

$$H_{\text{ZGN}}(k_x) = \sum_j [c(k_x) t_{2j+1}^{\text{ZGN}} a_{2j+1}^\dagger b_{2j+2} + t_{2j+2}^{\text{ZGN}} b_{2j+2} a_{2j+3}^\dagger] + \text{H.c.}, \quad (12)$$

where $c(k_x) = 2 \cos \sqrt{3}k_x/2$,

$$t_j^{\text{ZGN}} = t_0 [1 + \alpha(1 - N_{j+1}^{\text{ZGN}} \cdot N_j^{\text{ZGN}})] \times \exp[-\beta(t_{j+1,j}^{\text{ZGN}} - 1)] \quad (13)$$

is the hopping parameter between the sites $j+1$ and j in the y direction, $N_j^{\text{ZGN}} = N(y_j^{\text{ZGN}})$ defined as in Eq. (5), and

$$t_{j+1,j}^{\text{ZGN}} = \sqrt{1 + [z(y_{j+1}^{\text{ZGN}}) - z(y_j^{\text{ZGN}})]^2}, \quad (14)$$

where

$$y_j^{\text{ZGN}} = y^{\text{ZGN}}(j) = \frac{1}{4} \{3j + \frac{1}{2}[1 - (-1)^j]\} \quad (15)$$

are the positions of carbon atoms in unrippled graphene and $j = 1, 2, \dots, N$ labels the sites as is displayed in Fig. 2.

III. UNIAXIAL PERIODIC RIPPLE

Let us now study in this section the particular case of a periodic uniaxial ripple. This kind of corrugation is commonly observed when graphene is grown on a substrate [6]. In particular, we will consider that the periodic uniaxial ripple has the following form:

$$z(y) = \lambda \cos(2\pi\sigma y + \phi). \quad (16)$$

This particular oscillation contains three parameters: wavelength (controlled by the parameter σ), amplitude (controlled by λ), and phase (controlled by ϕ). Thus, σ is translated into a ripple with a spatial wavelength Λ such that $\Lambda = 2\pi a/\sigma$. Small σ 's compared with the lattice parameter a are translated into long-wavelength ripples. The amplitude λ is the maximal height reached by the ripples, usually given in nanometers or in percentages of a .

Now we will discuss briefly the feasibility of such a specific ripple. Since graphene exhibits a high asymmetry in tensile versus compressive strain, i.e., while the C-C bond length can be tensile up to 25% [2] of the lattice parameter, it is almost incompressible because this would induce out-of-plane deformations. Thus, in general, to produce this ripple it is enough to apply uniaxial strain. Also, it has been observed that, growing graphene on a substrate, 1D periodic graphene ripples can be built by using thermal strain engineering and the anisotropic stress due to the substrate [32]. On the other hand, as we will see later, we will use a big ripple's amplitude ($\lambda = 80\%$ of the lattice parameter) in all of our plots for illustrative purposes. Even though this value is high, the most important of our results depend only upon the ripple's wavelength (σ) and are valid for all values of λ .

Another important aspect of the electronic properties is the wave function localization. For studying it, we will use the normalized participation ratio (N_{PR}), defined as

$$N_{\text{PR}}(E) = \frac{\ln \sum_{j=1}^N |\psi(j)|^4}{\ln N}. \quad (17)$$

This quantity is a measure of the wavefunction localization [33] for extended states $N_{\text{PR}} \rightarrow -1$ (blue color in the figures), whereas it tends to zero for localized states (red color in the figures). In the next section, we will study the physical effects on the electronic properties of AGNs and ZGNs under the previously described periodic ripples.

A. AGNs with uniaxial periodic ripples

When we apply a uniaxial periodic ripple as given by Eq. (16) to AGNs, the hopping integral becomes

$$t_j^{\text{AGN}} = t_0 [1 + \alpha(1 - N_{j+1}^{\text{AGN}} \cdot N_j^{\text{AGN}})] \times \exp \left\{ -\beta \left[\sqrt{1 + 4\lambda^2 \sin^2 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \pi \sigma \right) \xi_A^2(j+1/2)} - 1 \right] \right\}, \quad (18)$$

where $\xi_A(j) = \sin(\sqrt{3}\pi\sigma j + \phi)$. To get a better understanding, it is worth considering the small-amplitude case. Using

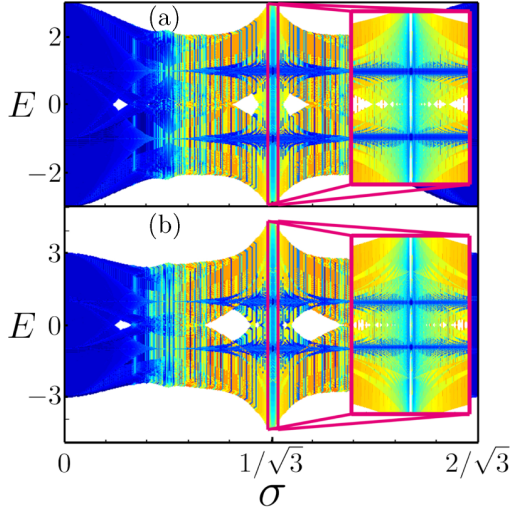


FIG. 3. (Color online) Energy spectrum of AGNs as a function of σ for $\lambda = 0.8$, using (a) $\alpha = 0.4$ and (b) $\alpha = 0$ obtained by solving the Schrödinger equation for a system of 400 atoms, using 250 grid points for sampling k_x and with cyclic boundary conditions. The different colors represent the normalized participation ratio $N_{PR}(E)$.

Eq. (18), the hopping interchain parameter becomes

$$t_j^{\text{AGN}} \approx t_0 \exp \left[-2\beta\lambda^2 \sin^2 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \pi \sigma \right) \xi^2(j+1/2) \right] \approx t_0 - 2t_0\beta\lambda^2 \sin^2 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \pi \sigma \right) \xi^2(j+1/2). \quad (19)$$

This expression is quite similar to the hopping integral that appears in the off-diagonal Harper model [26]; the main difference here is that all terms are squared. Hence, we expect the period in σ to be half of the period of AGNs under uniaxial periodic strain. Otherwise, both spectra would be really similar in the low-energy or long-wavelength limit, as can be confirmed in Fig. 3. Therein, it is shown the spectrum of H_{AGN} as a function of σ for (a) $\alpha = 0$ and (b) $\alpha = 0.4$, obtained using cyclic boundary conditions by diagonalizing the resulting matrix for each value of k_x . Many interesting features are observed. First, the spectrum has a fractal nature with gaps at the Fermi level. Second, we observe that localized states coexist with extended ones. It is easy to understand this feature, since when the period of the lattice is commensurable with the ripple's period the system behaves as a modulated crystal, and the states have a Bloch nature; these are extended. When the periods are incommensurate with each other, the system behaves as a quasicrystal and the wave functions tend to have different localization properties. Finally, we observe that the effect of relative orientation changes between π orbitals (i.e., the α -dependent-term effects) is to produce a widening of the spectrum, which becomes important for σ around $1/\sqrt{3}$. To gain further insight into the spectrum, consider the interesting transition seen as σ goes from zero to $\sigma = 1/\sqrt{3}$, as shown in detail in Fig. 4. Therein, the band structure is displayed for (a) $\sigma = 0.6/\sqrt{3}$, (b) $\sigma = 0.8/\sqrt{3}$, and (c) $\sigma = 1/\sqrt{3}$. This transition goes from unrippled graphene to a system made up of weakly coupled dimers. The dimers are made from pairs of

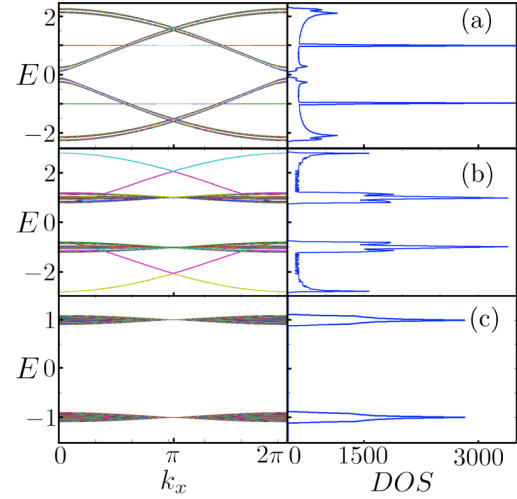


FIG. 4. (Color online) Band structure and density of states (DOS) of an AGN for $\phi = 0$ and $\lambda = 0.8$ using (a) $\sigma = 0.6/\sqrt{3}$, (b) $\sigma = 0.8/\sqrt{3}$, and (c) $\sigma = 1/\sqrt{3}$ for a system with 200 atoms. Cyclic boundary conditions were used.

sites joined by a horizontal bond as shown in Fig. 1. The dimers appear since for $\sigma = 1/\sqrt{3}$, the hopping parameter becomes $t_j^{\text{AGN}} = t(\lambda = 0.8) \approx 0.05t_0$. The exact expression of $t(\lambda)$ will be given in the next section. Thus, $t(\lambda = 0.8) \ll t_0$ and t_j can be considered as a weak perturbation to a system made of pure dimers. The eigenenergies of the dimers are highly degenerate, with values $E = \pm t_0$ as observed in Fig. 4(a). The effect of $t(\lambda)$ is just a widening around these values, giving a spectrum in the intervals $[\pm t_0 - t(\lambda = 0.8), \pm t_0 + t(\lambda = 0.8)]$, as observed in Fig. 4(a). As $\sigma \rightarrow 0$, the dimers evolve into the Van Hove singularity at $E = \pm t_0$ observed in unrippled graphene. Also, the system can be treated as a ladder with $t_j^{\text{AGN}} = \langle t \rangle + \delta_j$, where $\langle t \rangle$ is the average hopping parameter, and δ_j is a small perturbing potential, $\delta_j \ll \langle t \rangle$. For example, the case (c) in Fig. 4 corresponds to weakly coupled squares.

Before showing how the case $\sigma = 1/\sqrt{3}$ can be solved analytically, leading to weakly coupled dimers, let us discuss the band structures displayed in Fig. 5. Therein are shown the band structure and the DOS for σ values that are

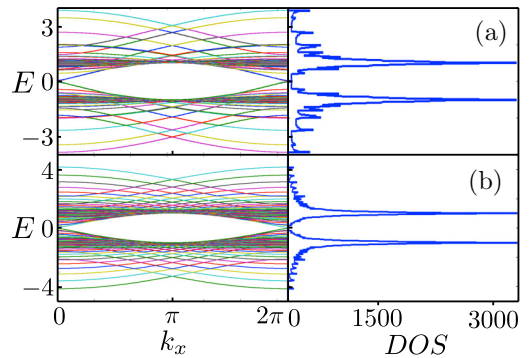


FIG. 5. (Color online) Band structure and DOS for an AGN using (a) $\sigma = 4\sqrt{5}/3$ and (b) $\sigma = 0.4\sqrt{7}/3$ for $\alpha = 0.4$ and the same conditions as in Fig. 4. Note that there are two partially flat bands at $E = \pm 1$ and that the DOS is spiky.

incommensurable with the period of unrippled AGNs. In these cases, the dimer model is still useful. When $t_j^{\text{AGN}} \rightarrow 0$ the effective system is made of dimers with two different intradimer hopping parameters t_0 and $t_0 d(k_x)$, with eigenenergies ± 1 . These energies are highly degenerate because of the factor $d(k_x)$. When t_j^{AGN} becomes quasiperiodic, the degeneracy is broken and the spectrum is fragmented, as observed in Fig. 5. However, the other dimers with hopping parameter given by t_0 are not affected. This kind of dimers are the ones responsible for the partly flat bands at $\pm t_0$.

Particular case $\sigma = 1/\sqrt{3}$

For $\sigma = 1/\sqrt{3}$, the eigenenergies can be calculated exactly. At this particular σ value the hopping integral can be written as follows:

$$t_j^{\text{AGN}} = t(\lambda) = t_0 \exp[-\beta(\sqrt{1+4\lambda^2} - 1)]. \quad (20)$$

Hence, the unit cell contains only four different kinds of site. Note that for big λ we have $t(\lambda) \rightarrow 0$ and the effective system is made of two different dimers, corresponding to horizontal pairs of atoms, with interdimer hopping parameter t_0 and $t_0 d(k_x)$. This confirms the previous discussion and the band structure shown in Fig. 4(c). The eigenenergies for such a system are

$$E(k_x) = \pm t_0 \sqrt{1 + [t(\lambda)]^2 \pm 2t(\lambda)|\cos(k_x/2)|}. \quad (21)$$

From the previous equation one can prove that the gap's size is

$$\Delta_{\text{AGN}} = 2|t(\lambda) - t_0|. \quad (22)$$

which is the same that we obtained using the intervals $[\pm t_0 - t(\lambda = 0.8), \pm t_0 + t(\lambda = 0.8)]$ when perturbation theory was applied. It is worth finding the minimum value of λ for opening a gap. It is easy to show that this occurs for any $\lambda > 0$, which is an important result for applications, due to the fact that it is possible to tailor the gap's size at the Fermi level by using Eq. (22) with a ripple amplitude within the elastic response of graphene.

B. ZGN with periodic uniaxial ripples

When a ripple given by Eq. (16) is applied to ZGNs, the hopping integral becomes

$$\begin{aligned} t_j^{\text{AGN}} &= t_0 [1 + \alpha(1 - N_{j+1}^{\text{ZGN}} \cdot N_j^{\text{ZGN}})] \\ &\times \exp \left\{ -\beta \left[\sqrt{1 + 4\lambda^2 \sin^2 \left(\frac{\pi}{2} \sigma \varphi_j \right)} \xi_Z^2 (3j/2 + 1) - 1 \right] \right\}, \end{aligned} \quad (23)$$

where $\varphi_j = [3 + (-1)^j]/4$ and $\xi_Z(j) = \sin(\pi \sigma j + \phi)$. Further insight can be obtained by analyzing the case of small-amplitude ripples, in which the hopping parameter is as follows:

$$\begin{aligned} t_j^{\text{ZGN}} t_0 &\approx \exp \left\{ -2\beta \lambda^2 \sin^2 \left(\frac{\pi}{2} \sigma \varphi_j \right) \xi_Z^2 (3j/2 + 1) \right\} \\ &\approx t_0 - 2t_0 \beta \lambda^2 \sin^2 \left(\frac{\pi}{2} \sigma \varphi_j \right) \xi_Z^2 (3j/2 + 1). \end{aligned} \quad (24)$$

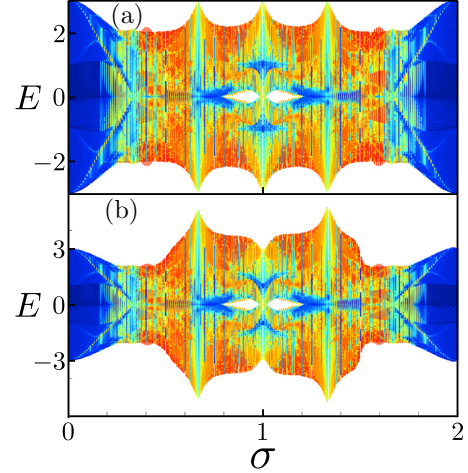


FIG. 6. (Color online) Energy spectrum of a ZGN as a function of σ for (a) $\lambda = 0.8$ and $\alpha = 0$, and (b) $\lambda = 0.8$ and $\alpha = 0.4$ obtained by solving the Schrödinger equation for a system of 80 atoms, using 250 grid points for sampling k_x and with cyclic boundary conditions. The different colors represent the normalized participation ratio $N_{\text{PR}}(E)$. Note that the gaps at the Fermi level are fewer and smaller than in AGN ripples; the wave functions are more localized as well.

Again, this hopping integral is very similar to that for ZGNs under uniaxial periodic strain [19]. As in AGNs, the main difference is that all terms are squared. That makes the period one-half of that in the uniaxially periodically strained ZGNs, as confirmed in Fig. 6. There in, we show the energy spectrum for ZGNs obtained using cyclic boundary conditions and by diagonalizing the corresponding matrix for each value of k_x . Two different values of α were used, (a) $\alpha = 0$ and (b) $\alpha = 0.4$. There are many interesting features. First, the states are more localized than in the AGN case. Second, the gaps at the Fermi level are smaller than the gaps in AGNs. Third, ZGNs are more sensitive to the effect of α ; however, as in AGNs, this effect is just a widening of the energy spectrum. The structure still being the same as in the case $\alpha = 0$, especially for values near or at $\sigma = 2/3, 4/3$ [see Figs. 6(a) and 6(b)]. For $\sigma = 2/3, 4/3$, we have

$$t_j^{\text{ZGN}} = t_{\text{eff}}(\lambda) = t(3\lambda/4) \left[1 + \alpha \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + 4\pi^2 \lambda^2 / 3}} \right) \right], \quad (25)$$

where $t(\lambda)$ is given by Eq. (20). This equation does not depend upon the site. Substituting all the parameters and by using $\lambda = 0.8$, the hopping parameter is found to be $t_{\text{eff}}(\lambda = 0.8) \approx 0.19t_0$ for $\alpha = 0.4$ and $t_{\text{eff}}(\lambda = 0.8) \approx 0.15t_0$ for $\alpha = 0$. Thus, in these cases, the system has a ZGN-like spectrum with hopping parameter t_{eff} . Although t_{eff} depends upon α , this effect is small and the spectrum at the points $\sigma = 2/3, 4/3$ is very narrow, as seen in Fig. 6. For σ near to that point the spectrum is highly fragmented, because the α -dependent terms become important. They act as a perturbation potential, splitting the band structure; therefore, the spectrum is wider near $\sigma = 2/3, 4/3$, as can be observed in Fig. 7(b).

Let us now discuss the transition observed in Fig. 7 as σ goes from zero to 1.

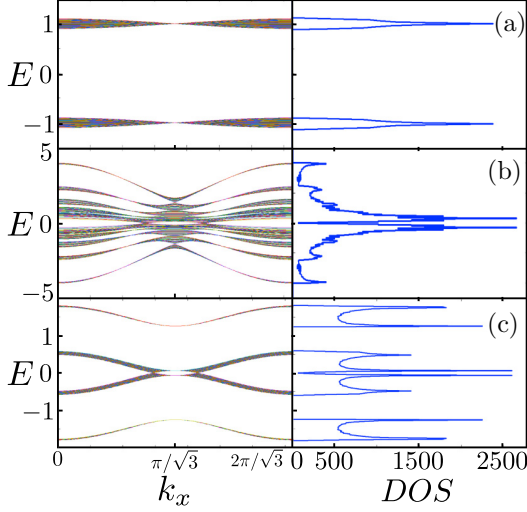


FIG. 7. (Color online) Band structure and density of states (DOS) of a ZGN for $\phi = 0$, $\lambda = 0.8$ using (a) $\sigma = 1$, (b) $\sigma = (\sqrt{5} - 1)/2$, and (c) $\sigma = 1/4$. The same conditions as in Fig. 6 were used. Note the big gap opened at the Fermi level in (a); in (b) the band structure is fragmented and hence the DOS has a lot of spikes, and in (c) the DOS is similar to that of linear chains weakly interacting.

1. Case $\sigma = 1/4$

For $\sigma = 1/4$, the band structure and DOS are shown in Fig. 7(c). In this case, the unit cell has only four different atoms, with hopping parameters given by

$$\begin{aligned} t_1^{\text{ZGN}} &= t_1 = t(\lambda/2) \left[1 + \alpha \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \pi^2 \lambda^2}} \right) \right], \\ t_2^{\text{ZGN}} &= t_2 = t_0 + t_0 \alpha \left(1 - \frac{1 - \pi^2 \lambda^2}{1 + \pi^2 \lambda^2} \right), \\ t_3^{\text{ZGN}} &= t_1, \\ t_4^{\text{ZGN}} &= t(\lambda), \end{aligned} \quad (26)$$

where $t(\lambda)$ is defined in Eq. (20). The eigenenergies can be calculated exactly,

$$E(k_k) = \pm [t(\lambda) + t_2] \pm \sqrt{[t(\lambda) - t_2]^2 + 16t_1^2 \cos^2(\sqrt{3}k_x/2)}. \quad (27)$$

From the dispersion relation it can be seen that the system behaves as a linear chain with two different atoms, hopping parameter giving by t_1 , and self-energies $t(\lambda)$ and t_2 . When σ takes irrational values near $\sigma = 1/4$ the degeneracy is broken and the DOS becomes spiky, as can be seen in Fig. 7(b).

Finally, the case $\sigma = 1$ is displayed in Fig. 7. Note that this case [Fig. 7(a)] is the same as in Fig. 4(c). Let us explain this feature. When $\sigma = 1$, the hopping parameter takes two different values depending on the parity of j ; if j is odd, $t_j^{\text{ZGN}} = t_0$ whereas if it is even, $t_j^{\text{ZGN}} = t(\lambda = 0.8) \approx 0.05t_0$. So the effective system is again made of dimers with intradimer hopping integrals given by $t(\lambda = 0.8)c(k_x)$ and t_0 . Due to $t(\lambda = 0.8) \ll t_0$ the effective system can be seen as weakly coupled dimers with hopping parameter $t(\lambda = 0.8)c(k_x)$. Hence, the gap's size must be $2|2t(\lambda = 0.8) - t_0|$ the main

difference from AGNs is that here we have $2t(\lambda)$, due to $c(k_x) = 2 \cos(\sqrt{3}k_x)/2$. This prediction will be confirmed by calculating the eigenenergies analytically in the next section.

2. Case $\sigma = 1$

We first calculate the hopping parameter

$$t_j^{\text{ZGN}} = \begin{cases} t_0 & \text{if } j \text{ is even,} \\ t(\lambda) = \exp\{-\beta[\sqrt{1 + 4\lambda^2} - 1]\} & \text{if } j \text{ is odd.} \end{cases} \quad (28)$$

Thus, the effective system just has four different atoms per unit cell, and the effective chain is made of dimers with hopping parameter $t_0 c(k_x)$. The eigenenergies for this system as a function of λ and k_x are

$$E(k_x) = \pm t_0 \pm 2t(\lambda) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right). \quad (29)$$

To confirm the gap's size predicted before, we calculate it from Eq. (29), resulting in

$$\Delta_{\text{ZGN}} = 2|2t(\lambda) - t_0|. \quad (30)$$

In this case, a gap is opened for $\lambda \geq \lambda_C$, where

$$\lambda_C = \frac{1}{2} \sqrt{\left(1 + \frac{1}{\beta} \ln 2\right)^2 - 1} \approx 0.34. \quad (31)$$

This minimal value of λ_C for opening a gap at the Fermi level exceeds the elastic response of graphene and thus seems difficult to observe experimentally.

IV. CONCLUSIONS

Summarizing, we have analyzed the electronic properties of AGNs and ZGNs under uniaxial periodic ripples, using an exact mapping of the corresponding tight-binding Hamiltonian into effective one-dimensional chains. In particular, we studied uniaxial periodic ripples, finding complex spectra, gaps at the Fermi level, and flat bands for AGNs. All these features can be understood by looking at an effective system which is made of dimers. For instance, when σ is commensurable with the characteristic period of the lattice the effective system behaves as weakly coupled dimers resulting, for λ big, in flat bands for AGNs. However, when this is not the case, the reciprocal space becomes dense, which results in a fractal spectrum.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported by Dirección General de Asuntos del Personal Académico-Programa de Apoyos de Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (DGAPA-PAPIIT) Project No. IN-102513, and by the Dirección General de Cómputo y de Tecnologías de la Información y Comunicación (DGTIC)-NES center. P.R.-T. acknowledges support from Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) (Mexico). G.N. thanks the DGAPA-PASPA program for partial financial support by a sabbatical scholarship at the George Mason University in Fairfax, Virginia.

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
- [2] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, *Science* **321**, 385 (2008).
- [3] J. C. Meyer, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, T. J. Booth, and S. Roth, *Nature (London)* **446**, 60 (2007).
- [4] J. Meyer, A. Geim, M. Katsnelson, K. Novoselov, D. Obergfell, S. Roth, C. Girit, and A. Zettl, *Solid State Commun.* **143**, 101 (2007).
- [5] E. Stolyarova, K. T. Rim, S. Ryu, J. Maultzsch, P. Kim, L. E. Brus, T. F. Heinz, M. S. Hybertsen, and G. W. Flynn, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **104**, 9209 (2007).
- [6] N. A. Vinogradov, A. A. Zakharov, V. Kocevski, J. Rusz, K. A. Simonov, O. Eriksson, A. Mikkelsen, E. Lundgren, A. S. Vinogradov, N. Mårtensson, and A. B. Preobrajenski, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 026101 (2012).
- [7] V. M. Pereira, A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres, *Phys. Rev. B* **80**, 045401 (2009).
- [8] F. Guinea, in *Exploring Graphene, Recent Research Advances*, special issue of *Solid State Commun.* **152**, 1437 (2012).
- [9] D. A. Bahamon and V. M. Pereira, *Phys. Rev. B* **88**, 195416 (2013).
- [10] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, *J. Phys.: Condens. Matter* **26**, 125302 (2014).
- [11] V. M. Pereira and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 046801 (2009).
- [12] M. T. Ong and E. J. Reed, *ACS Nano* **6**, 1387 (2012).
- [13] D. Zhan, J. Yan, L. Lai, Z. Ni, L. Liu, and Z. Shen, *Adv. Mater.* **24**, 4055 (2012).
- [14] E. Prada, P. San-Jose, G. León, M. M. Fogler, and F. Guinea, *Phys. Rev. B* **81**, 161402 (2010).
- [15] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **88**, 085430 (2013).
- [16] M. M. Fogler, F. Guinea, and M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 226804 (2008).
- [17] D. A. Gradinar, M. Mucha-Kruczyński, H. Schomerus, and V. I. Fal'ko, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 266801 (2013).
- [18] R. Carrillo-Bastos, D. Faria, A. Latgé, F. Mireles, and N. Sandler, *Phys. Rev. B* **90**, 041411 (2014).
- [19] G. G. Naumis and P. Roman-Taboada, *Phys. Rev. B* **89**, 241404 (2014).
- [20] P. Roman-Taboada and G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **90**, 195435 (2014).
- [21] C. R. Woods, L. Britnell, A. Eckmann, R. S. Ma, J. C. Lu, H. M. Guo, X. Lin, G. L. Yu, Y. Cao, R. V. Gorbachev, A. V. Kretinin, J. Park, L. A. Ponomarenko, M. I. Katsnelson, Y. Gornostyrev, K. Watanabe, T. Taniguchi, C. Casiraghi, H. J. Gao, A. K. Geim, and K. S. Novoselov, *Nat. Phys.* **10**, 451 (2014).
- [22] N. Nemeč and G. Cuniberti, *Phys. Rev. B* **75**, 201404 (2007).
- [23] L. A. Chizhova, F. Libisch, and J. Burgdörfer, *Phys. Rev. B* **90**, 165404 (2014).
- [24] G. Gumbs, A. Iurov, D. Huang, and L. Zhemchuzhna, *Phys. Rev. B* **89**, 241407 (2014).
- [25] G. L. Yu, R. V. Gorbachev, J. S. Tu, A. V. Kretinin, Y. Cao, R. Jalil, F. Withers, L. A. Ponomarenko, B. A. Piot, M. Potemski, D. C. Elias, X. Chen, K. Watanabe, T. Taniguchi, I. V. Grigorieva, K. S. Novoselov, V. I. Fal'ko, A. K. Geim, and A. Mishchenko, *Nat. Phys.* **10**, 525 (2014).
- [26] P. G. Harper, *Proc. Phys. Soc., London, Sect. A* **68**, 874 (1955).
- [27] D. R. Hofstadter, *Phys. Rev. B* **14**, 2239 (1976).
- [28] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [29] E.-A. Kim and A. H. C. Neto, *EPL (Europhys. Lett.)* **84**, 57007 (2008).
- [30] R. M. Ribeiro, V. M. Pereira, N. M. R. Peres, P. R. Briddon, and A. H. C. Neto, *New J. Phys.* **11**, 115002 (2009).
- [31] F. Guinea, M. I. Katsnelson, and A. K. Geim, *Nat. Phys.* **6**, 30 (2010).
- [32] K.-K. Bai, Y. Zhou, H. Zheng, L. Meng, H. Peng, Z. Liu, J.-C. Nie, and L. He, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 086102 (2014).
- [33] G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **76**, 153403 (2007).

Artículo D

Topological flat bands in time-periodically driven
uniaxial strained graphene nanoribbons

Pedro Roman-Taboada, G. G. Naumis

El artículo ha sido publicado en
Physical Review B Vol. 95, pp. 115440, 2017.

The layout has been revised.

Topological flat bands in time-periodically driven uniaxial strained graphene nanoribbons

Pedro Roman-Taboada* and Gerardo G. Naumis

*Departamento de Sistemas Complejos, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM),
Apartado Postal 20-364, 01000 México, Ciudad de México, México*

(Received 6 September 2016; revised manuscript received 15 February 2017; published 30 March 2017)

We study the emergence of electronic nontrivial topological flat bands in time-periodically driven strained graphene within a tight-binding approach based on the Floquet formalism. In particular, we focus on uniaxial spatially periodic strain since it can be mapped onto an effective one-dimensional system. Also, two kinds of time-periodic driving are considered: a short pulse (delta kicking) and a sinusoidal variation (harmonic driving). We prove that for special strain wavelengths, the system is described by a two-level Dirac Hamiltonian. Even though the study case is gapless, we find that topologically nontrivial flat bands emerge not only at zero-quasienergy but also at $\pm\pi$ quasienergy, the latter being a direct consequence of the periodicity of the Floquet space. Both kind of flat bands are thus understood as dispersionless bands joining two inequivalent touching band points with opposite Berry phase. This is confirmed by explicit evaluation of the Berry phase in the touching band points' neighborhood. Using that information, the topological phase diagram of the system is built. Additionally, the experimental feasibility of the model is discussed and two methods for the experimental realization of our model are proposed.

DOI: [10.1103/PhysRevB.95.115440](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.115440)**I. INTRODUCTION**

It is a well known fact that the electronic properties of graphene depend strongly upon the deformation field applied to it, due, in part, to its high elastic response (about 23% of the lattice parameter [1]). In fact, very interesting phenomena arise from applying different kinds of deformation fields. Among these phenomena we have band gap openings at the Fermi level [2,3], shifts of the Dirac cones from their original positions [2,4], localized energy edge modes [5,6], fractal-like energy spectrum [5,7,8], merging of inequivalent Dirac cones [5,9–11], tunable dichroism [12], anisotropic ac conductivity [13], new and interesting transport properties [14–17], etc. All these have opened an avenue for the emergent field of straintronics [2,18–22], whose aim is to tailor the electronic properties of graphene via mechanical deformations.

On the other hand, although graphene is a semimetal, it possesses nontrivial topological properties [23]. For instance, the zero-energy edge states observed in graphene are flat bands that join two inequivalent Dirac cones [9]. Flat bands have their origin in the energy spectrum, which can host lines or points where bands touch each other at zero energy, as was first pointed out by Volovik [23–25]. This results from the Dirac equation topological properties. In fact, two inequivalent Dirac cones in graphene have opposite Berry phase. Since the states at the Dirac cone cannot be transformed into topologically trivial states (with Berry phase equal to zero), a flat band joining Dirac cones with opposite Berry phase emerges for a finite system [23]. The three-dimensional (3D) version of Dirac semimetals (usually called Weyl semimetals) also gives rise to flat bands, known as Fermi arcs, joining Weyl points (points at zero energy where the bands cross each other) with opposite topological charge. These flat bands, as the ones that emerge in Dirac semimetals, are very stable, since both of them are protected by the bulk-edge correspondence [23].

This is a consequence of the fact that in the neighborhood of Weyl nodes, the effective Hamiltonian of the system can be described by a Weyl equation. Therefore wave functions describe Weyl fermions with opposite chirality [26], which means that the only way to open a gap is by the annihilation of two Weyl nodes with opposite chirality. Interestingly enough, recent experiments have shown Fermi arcs in real condensed matter systems [26,27].

The importance of flat bands stems from their potential to be used in technological applications as topological quantum computing [28]. This is possible since Dirac and Weyl nodes always come in pairs and might have a Majorana-like nature [29–32], which gives them robustness to weak perturbations and decoherence [28].

Hence many theoretical condensed matter systems that exhibit topological edge modes have been proposed, among them, the most promising ones seem to be periodically driven systems, studied under the Floquet approach [28,33–44]. Actually, these systems are able to host not only zero energy flat bands but also $\pm\pi$ -energy flat bands [40,45]. This results from the periodicity of the so-called quasienergy spectrum, which arises in the frame of Floquet theory. Motivated by that, in this article, we study the case of time periodically uniaxial strained zigzag graphene nanoribbons (ZGNs) within the tight-binding approach using the Floquet formalism, and, for the sake of simplicity, in the small strain's amplitude limit. We have found that the case system supports two kinds of zero-quasienergy flat bands and just one kind of $\pm\pi$ quasienergy flat bands. For the zero-quasienergy flat bands, we found that one is the well known zero edge state observed in pristine ZGNs, which is well understood in terms of flat bands joining two inequivalent Dirac cones with opposite chirality [23] or in terms of the Zak phase [46]. The others arise as a consequence of the driving and can be understood as flat bands joining touching band points with opposite Berry phase.

The layout of this paper is the following. First we present in Sec. II the model, then in Sec. III we present the quasienergy spectrum obtained from numerical results. Section IV is

*peter89@fisica.unam.mx

devoted to explain such results using an analytical approach based on an effective Hamiltonian. Section V contains an analysis of the analytical found spectrum and the topological phase diagram. In Sec. VI, we prove the nontrivial topological properties of the modes, while Sec. VII is devoted to a study of the experimental feasibility of our model. Finally, in Sec. VIII, the conclusions are given.

II. PERIODICALLY DRIVEN STRAINED GRAPHENE

We start by considering a pristine zigzag graphene nanoribbon (ZGN) as the one displayed in Fig. 1(a). Then, we apply an uniaxial strain field along the y direction $u(y)$ given by

$$u(y) = \frac{2\lambda}{9} \cos \left[\frac{8\pi}{3} \sigma (y - 1/2) + \phi \right], \quad (1)$$

which is similar to the pattern of strain that emerges when graphene is grown on top of a different lattice substrate [7]. It is important to say that the strain field is tailored by three parameters, namely, the amplitude (λ), the frequency (σ) and, finally, the phase (ϕ). Within the tight-binding approach and considering the small strain's amplitude limit the electronic properties of an uniaxial strained ZGN are well described by the following effective one-dimensional (1D) Hamiltonian [7]

$$H(k_x) = \sum_{j=1}^{N-1} [\gamma_{2j} a_{2j+1}^\dagger b_{2j} + c(k_x) \gamma_{2j-1} a_{2j-1}^\dagger b_{2j}] + \text{H.c.}, \quad (2)$$

where $c(k_x) = 2 \cos(\sqrt{3}k_x/2)$, a is the interatomic distance between carbon atoms, k_x is the crystal momentum in x direction, a_j (b_j) annihilates an electron at the j th site in the sub lattice A (B) along the y direction, and N is the number of atoms within the unit cell (see Fig. 1). Finally, the hopping parameters are given by

$$\gamma_j = \gamma_0 + \lambda \gamma_0 \xi(j+1) \sin[\pi \sigma \xi(j)] \sin(2\pi \sigma j + \phi), \quad (3)$$

where $\xi(j) = 1 + (-1)^j/3$ and $\gamma_0 = 2.3$ eV is the hopping parameter for unstrained graphene. Frequently, we will use a (the interatomic distance between carbon atoms) as the unit of distance and γ_0 as the unit of energy, although, when necessary we will explicitly write them. Having said that, let us introduce the time dependence to the model. That will be

done by considering the following driving layout:

$$\gamma_j(t) = \begin{cases} \gamma_0 & \text{if } t < \text{mod}(t, T) < t_1 \\ \gamma_j & \text{if } t_1 < \text{mod}(t, T) < T \end{cases}, \quad (4)$$

where T is the period of the driving and t_1 is in the range $0 < t_1 < T$. This leads to the following time-dependent Hamiltonian:

$$H(k_x, t) = \sum_{j=1}^{N-1} [\gamma_{2j}(t) a_{2j+1}^\dagger b_{2j} + c(k_x) \gamma_{2j-1}(t) a_{2j-1}^\dagger b_{2j}] + \text{H.c.} \quad (5)$$

The previous Hamiltonian describes a system for which the strain field is turned on during the interval (t_1, T) and it is turned off whenever t is on the range $(0, t_1)$. We will consider the case of short pulses, this is, $t_1 \rightarrow T$. As long as the product of the kicking amplitude (here represented by the parameter λ , the strain's amplitude) and the duration of the pulse $T - t_1$ are kept constant, the kicking can be approximated by a Dirac delta function if the $t_1 \rightarrow T$ limit is considered. This kind of kicking layout can be hard to be reached in experimental conditions, therefore, we discuss the experimental feasibility of our model in a special section (see Sec. VII), therein, we also study a more realistic kind of driving: harmonic driving. However, it is worth mentioning that many theoretical papers consider a quite similar kind of kicking [41, 47–52].

From here, we will study the $t_1 \rightarrow T$ limit, then the driving protocol can be written as

$$\gamma_j(t) = \gamma_0 + \sum_m \delta(t/T - m) \gamma_0 \lambda \xi(j+1) \times \sin[\pi \sigma \xi(j)] \sin(2\pi \sigma j + \phi), \quad (6)$$

where m is an integer number and T is the period of the driving. An schematic layout of the driving is shown in Fig. 1. Therein, it can be seen that the strain field is turned on for $t = mT$ whereas is turned off for different times (this is, for $t \neq mT$).

The advantage of considering kicking systems relies in the fact that the time evolution operator defined as

$$U(T) |\psi_k(t)\rangle = |\psi_k(t+T)\rangle, \quad (7)$$

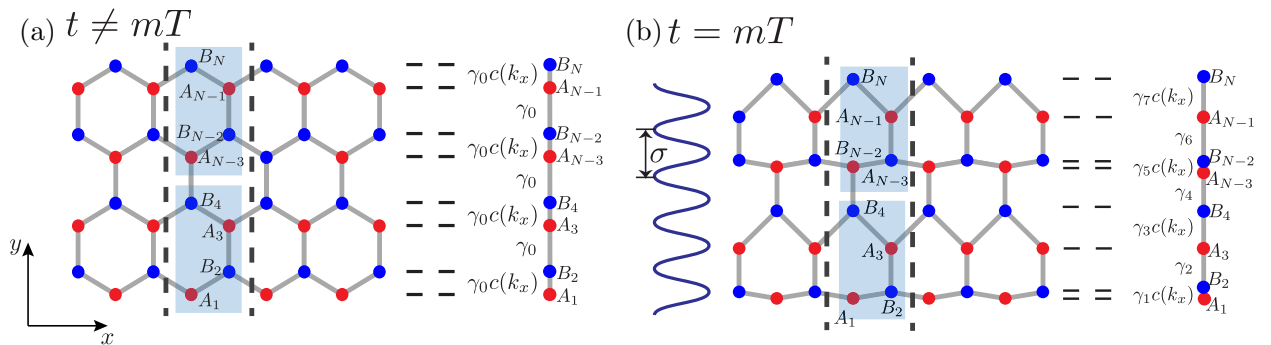


FIG. 1. Layout of the periodically driven strained zigzag graphene nanoribbon. Basically, the strain field is turned off (a) whenever that $t \neq mT$, where T is the driving period and m is an integer number. The strain field is turned on for $t = mT$, as shown in (b). Since the strain field depends only upon the y direction, the zigzag graphene nanoribbon can be mapped onto an effective one-dimensional system, which is represented by linear chains in the figure. The dots indicate the position of the atoms on each graphene/linear chain row.

where $|\psi_k(t)\rangle$ is the wave function of the system for a given k , can be written in a very simple manner:

$$U(\tau) = \mathcal{T} \exp \left[-i \int_0^\tau H(k_x, t) dt / \hbar \right] \\ = \exp(-i\tau H_1) \exp(-i\tau H_0), \quad (8)$$

where \mathcal{T} denotes the time ordering operator, $\tau \equiv T/\hbar$, and

$$H_0(k_x) = \gamma_0 \sum_{j=1}^{N-1} [a_{2j+1}^\dagger b_{2j} + c(k_x) a_{2j-1}^\dagger b_{2j}] + \text{H.c.} \\ H_1(k_x) = \sum_{j=1}^{N-1} [\delta\gamma_{2j} a_{2j+1}^\dagger b_{2j} + c(k_x) \delta\gamma_{2j-1} a_{2j-1}^\dagger b_{2j}] \\ + \text{H.c.} \quad (9)$$

with $\delta\gamma_j = \gamma_j - \gamma_0$. In general, Hamiltonians H_1 and H_0 do not commute, therefore, it is common to study the properties of the system through an effective Hamiltonian given by $U(\tau) = \exp(-i\tau H_{\text{eff}})$, which has eigenvalues $\exp(-i\tau\omega)$, where $\tau\omega$ is called the quasienergy of the system. Note that the product $\tau\omega$ is defined up to integer multiples of 2π due to the periodicity of the Floquet space. Our periodically driven model (5) is very rich, since it has four parameters, three owing to the strain field (λ , σ , and ϕ) and one to the driving (τ).

Even though one can study the system for different values of σ and ϕ we will focus on the case $\sigma = 1/2$ and $\phi = 4\pi\sigma/3$, because this case has very interesting features and makes possible to perform analytical calculations. For these values of σ and ϕ , the hopping parameter takes the following form:

$$\gamma_{2j-1} - \gamma_0 = -\lambda, \\ \gamma_{2j} - \gamma_0 = \lambda/2. \quad (10)$$

This means that the Hamiltonian H_1 is on a critical line that separates two distinct topological phases via the parameter λ in the time-independent case. In such a case, for $\lambda < \lambda_C = 0.4$, the system is on a nontrivial topological semimetal phase (i.e., the system is gapless, there are Dirac cones) and it is able to host edge modes [23]. For $\lambda > \lambda_C$, the system is on a normal Zak insulator phase (there are no Dirac cones and the system is gapped, however there still being zero energy edge states [9,10]). It is interesting to see what happens at the critical value λ_C . At that point, two inequivalent Dirac cones have merged and the dispersion relation has an anomaly, in the sense that it is quadratic in one direction, whereas in the other direction remains linear [5]. However, we have used the approximation of small strain's amplitude, so we are interested on $\lambda \ll \lambda_C$. The main reason for consider this is that provides a great simplification on theoretical calculations, moreover, it is much simpler to obtain small strain's amplitude in experimental setups.

Once that the model has been described, the next step is to analyze the quasienergy spectrum as a function of τ (the driving period) keeping σ , ϕ , and λ constant. The results of the numerical analysis, obtained by the numerical diagonalization of Eq. (8), are discussed in the next section.

III. QUASIENERGY SPECTRUM: NUMERICAL RESULTS

We begin the study of the physics properties of the system by constructing the matrix representation of $U(\tau)$, Eq. (8), then we obtain its eigenvalues by numerical diagonalization. In all cases presented here we studied ω as a function of k_x and τ , using $\sigma = 1/2$ and $\phi = 4\pi\sigma/3$ for a system of $N = 240$ sites per unit cell, and imposing fixed boundary conditions. The resulting quasienergy spectrum is shown in Fig. 2 for a cut at $k_x = 0$ using $\lambda = 0.1$. For small τ , the spectrum has a central gap that grows linearly with τ . As can be seen in such figure, the outer band edges also grow linearly with τ . Then, when τ reaches a critical value, denoted by τ_c , the outer edge bands touch the limit of the first Brillouin zone of the Floquet space. At that point, flat bands emerge at $\pm\pi$ quasienergies, these bands are labeled by red solid lines in Fig. 2. If we continue increasing τ , we will reach the point $\tau = 2\tau_c$, at which the outer edge bands will touch each other again and a new flat band appears at zero quasienergy (denoted by green solid lines, see Fig. 2). The flat nature of these bands and the fact that they are separated by a finite gap from the other bands suggest that they are due to surface effects. Moreover, since these states emerge at crossing band points, they have a similar origin as the edge states that appear in the Shockley model [38,53–55], which always come in pairs and can have an exotic Majorana-like nature. Actually, these kind of edge states have been predicted to appear in a 1D s -wave superconductor wire [36]. However, our system is two dimensional (2D), therefore we expect that edge modes that appear in Fig. 2 give rise to flat bands in the band structure, each of these flat bands made out of Majorana-like modes.

To confirm the previous conjecture, we plotted the quasienergy spectrum as a function of k_x for $\tau = 3$ (see Fig. 3) and $\tau = 5.28$ (see Fig. 4) under the same conditions of Fig. 2. In panels (b) of Figs. 3 and 4, we show the amplitude of the wave functions with flat dispersion for $k_x = 0$. Note that these states are localized near the edges of the unit cell and that they come in pairs. Additionally there is a finite gap (although not a full gap) that separates such states from the rest bands, which

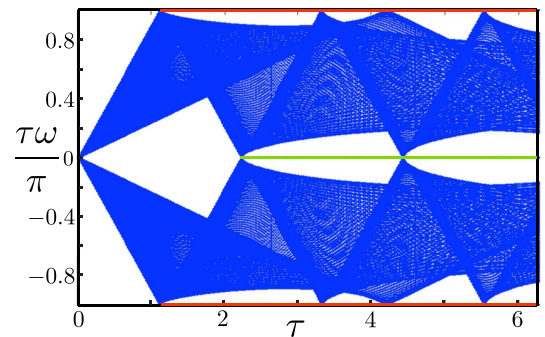


FIG. 2. Quasienergy spectrum numerically obtained from the eigenvalues of the matrix representation of Eq. (8). For making the plot, we have used $k_x = 0$, $\lambda = 0.1$, $\sigma = 1/2$, and $\phi = 4\pi\sigma/3$, $N = 240$ and fixed boundary conditions. Note that at certain values of τ the bands touch each other at $\tau\omega(0, k_y) = 0, \pm\pi$. At such points flat bands emerge, indicated in the figure by red solid lines for $\tau\omega = \pm\pi$ and by green solid lines for $\tau\omega = 0$.

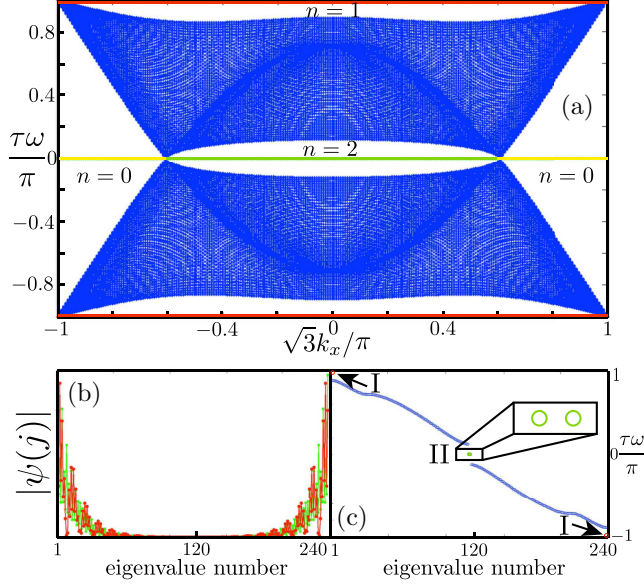


FIG. 3. (Top) Quasienergy band structure as a function of k_x for $\lambda = 0.1$, $\sigma = 1/2$, $\phi = 4\pi\sigma/3$, and $\tau = 3$. We have flat bands at zero and $\pm\pi$ quasienergies. Note that for $\tau\omega = 0$ there are two types of flat bands, ones having a time-independent origin (yellow solid lines) and the others having a time-dependent origin (green solid lines), this is explained in the main text. The index n indicates the corresponding region in the topological phase diagram and the types of edge states. For odd n , we have $\tau\omega = \pm\pi$ states (red color), while n even indicates zero-quasienergy edge states (green color). The case $n = 0$ stands for time-independent edge states at $\tau\omega = 0$ (yellow color). In panel (b), two wave functions amplitude for $\tau\omega = 0$ and $\tau\omega = \pi$ using $k_x = 0$ are shown. The amplitudes follow the same color code as in (a). (c) The quasienergy value is presented as a function of the quasienergy eigenvalue number for $k_x = 0$.

suggests that they have nontrivial topological properties and that they possess a Majorana-like nature. Furthermore, we can see three kinds of edge states, one at $\pm\pi$ quasienergy (indicated by I in solid red lines) and the others as zero quasienergy (indicated by II in yellow and green solid lines). The yellow flat bands, as we will discuss below, are the well known zero edge modes that emerge in a finite pristine ZGN due to edge effects and have nothing to do with the driving, whereas the other ones (the green and red ones) are a consequence of the driving. It is important to mention that flat bands are very robust under the driving. Note that flat bands always emerge from touching band points either at $\pm\pi$ or zero quasienergy, which suggests that the origin of them is quite similar to that of Fermi arcs, which join two different Weyl points (i.e., points on the momentum space at where energy vanishes) with opposite chirality [56]. To confirm or refuse that conjecture, a more detailed analysis is required. The next section is devoted to that aim.

IV. ANALYTICAL STUDY OF THE QUASIENERGY SPECTRUM

Once the numerical results have been established, we will proceed to explain them analytically. This will be done

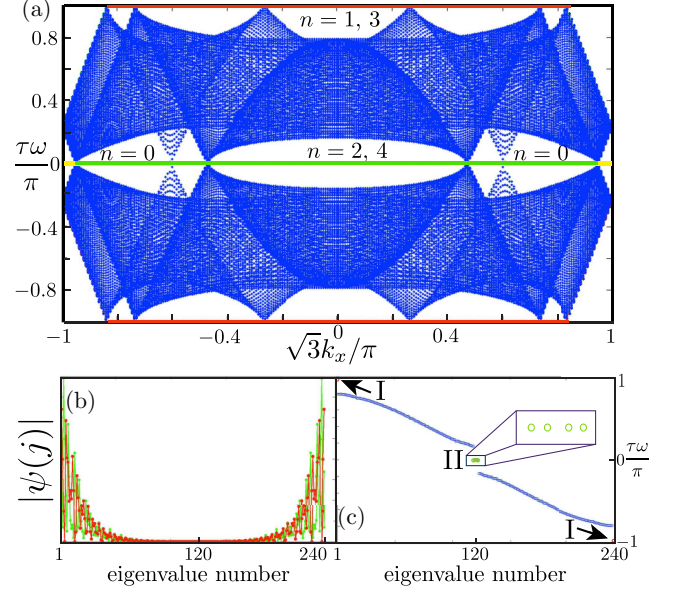


FIG. 4. (Top) Quasienergy band structure, made under the same conditions of Fig. 3 but using $\tau = 5.28$. The label n indicates the corresponding region in the topological phase diagram and the types of edge states. For odd n , we have $\tau\omega = \pm\pi$ states (red color), while n even indicates zero-quasienergy edge states (green color). The case $n = 0$ stands for time-independent edge states at $\tau\omega = 0$ (yellow color). In (b), we show the wave function amplitudes for edge states at $k_x = 0$ using the same color code as in (a). In (c), we present the quasienergy value as a function of the quasienergy eigenvalue.

by studying the quasienergy spectrum for $\sigma = 1/2$ and $\phi = 4\pi\sigma/3$, imposing cyclic boundary conditions in the y direction. This is possible because for $\sigma = 1/2$ the hopping parameters just take two different values [see Eq. (10)], therefore the system becomes periodic in the y direction and k_y is a good quantum number. We proceed as usual, i.e., first, we define the following Fourier transform for the annihilation operators:

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{N/2}} \sum_{k_y} e^{-i3k_y j/2} a_{k_y},$$

$$b_j = \frac{1}{\sqrt{N/2}} \sum_{k_y} e^{-i3k_y j/2} b_{k_y}, \quad (11)$$

and apply them into Hamiltonians H_1 and H_0 , Eq. (12). It is straightforward to show that the bulk Hamiltonians are given by

$$H_0(k_x, k_y) = h_0(k_x, k_y) \hat{\mathbf{h}}_0 \cdot \sigma,$$

$$H_1(k_x, k_y) = h_1(k_x, k_y) \hat{\mathbf{h}}_1 \cdot \sigma, \quad (12)$$

where σ_i ($i = x, y, z$) is a 2×2 Pauli matrix defined in the basis where σ_z is diagonal. The components of \mathbf{h}_0 and \mathbf{h}_1 are

$$h_0^{(x)}(k_x, k_y) = 2 \cos(\sqrt{3}k_x/2) + \cos(3k_y/2),$$

$$h_0^{(y)}(k_x, k_y) = \sin(3k_y/2),$$

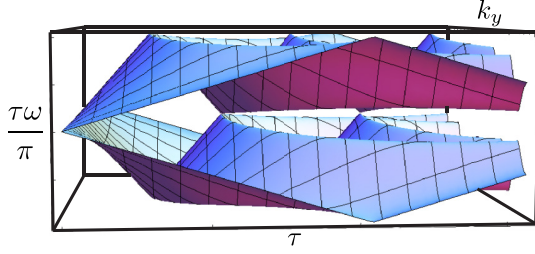


FIG. 5. Analytical quasienergy spectrum obtained from Eq. (18). In the vertical axis, we plot $\tau\omega/\pi$ as a function of k_y and τ for $k_x = 0$, $\lambda = 0.1$, $\sigma = 1/2$, and $\phi = 2\pi/3$. Note that this figure reproduces the quasienergy spectrum obtained numerically by a diagonalization of the Hamiltonian, as shown in Fig. 2. However, the flat bands that appear in Fig. 2 are missing here since this is a surface effect.

$$\begin{aligned} h_1^{(x)}(k_x, k_y) &= -2\lambda \cos(\sqrt{3}k_x/2) + \frac{\lambda}{2} \cos(3k_y/2), \\ h_1^{(y)}(k_x, k_y) &= \frac{\lambda}{2} \sin(3k_y/2). \end{aligned} \quad (13)$$

From this we define the norms $h_0 = |\mathbf{h}_0|$ and $h_1 = |\mathbf{h}_1|$. Therefore the time evolution operator, Eq. (8), is given by

$$\mathcal{U}(k_x, k_y, \tau) = \exp[-i\tau H_1(k_x, k_y)] \exp[-i\tau H_0(k_x, k_y)], \quad (14)$$

where $U(\tau) = \sum_{k_y} \mathcal{U}(\tau, k_x, k_y) \otimes |k_y\rangle \langle k_y|$. The Hamiltonians $H_1(k_x, k_y)$ and $H_0(k_x, k_y)$ do not commute since (see Appendix)

$$[H_1, H_0] = -6i\lambda \sin(3k_y/2) \cos(\sqrt{3}k_x/2) \sigma_z. \quad (15)$$

Yet, it is still being possible to write,

$$\mathcal{U}(k_x, k_y, \tau) = \exp[-i\tau H_{\text{eff}}(k_x, k_y)]. \quad (16)$$

Using the results obtained in Appendix, the effective Hamiltonian $H_{\text{eff}}(k_x, k_y)$ can be written as

$$H_{\text{eff}}(k_x, k_y) = \omega(k_x, k_y) \hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}} \cdot \sigma, \quad (17)$$

where $\hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}$ is a unit vector (whose explicit form is also given in Appendix). The quasienergies of the system, $\pm\tau\omega(k_x, k_y)$, are given by (see Appendix)

$$\begin{aligned} \cos[\tau\omega(k_x, k_y)] &= \cos(\tau h_1) \cos(\tau h_0) \\ &\quad - \hat{\mathbf{h}}_0 \cdot \hat{\mathbf{h}}_1 \sin(\tau h_1) \sin(\tau h_0) \end{aligned} \quad (18)$$

with

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{h}}_0 \cdot \hat{\mathbf{h}}_1 &= \frac{\lambda}{h_1 h_0} \left[-4 \cos^2(\sqrt{3}k_x/2) \right. \\ &\quad \left. - \cos(\sqrt{3}k_x/2) \cos\left(\frac{3k_y}{2}\right) + \frac{1}{2} \right]. \end{aligned} \quad (19)$$

Through Eq. (18), we are able to exactly reproduce the quasienergy bands obtained by numerical calculations. For example, in Fig. 5, we plot $\omega(0, k_y)$ obtained from Eq. (18), showing an excellent agreement with its numerical counterpart displayed in Fig. 2. Observe that cyclic boundary conditions were used for obtaining Fig. 5, and thus the edge states seen in Fig. 2 do not appear.

V. TOUCHING BAND POINTS

Since flat bands emerge from touching band points at $\tau\omega = n\pi$ (n an integer number), knowing its exact location is crucial. This is the subject of the present section. We start by observing that touching band points are obtained by setting $\tau\omega = n\pi$ in Eq. (18), resulting in the condition

$$\begin{aligned} \pm 1 &= \cos(\tau h_1) \cos(\tau h_0) \\ &\quad - \hat{\mathbf{h}}_0 \cdot \hat{\mathbf{h}}_1 \sin(\tau h_1) \sin(\tau h_0), \end{aligned} \quad (20)$$

where it is understood that the previous condition holds only for touching bands points. We will denote such special k points by using a star, i.e., (k_x^*, k_y^*) . A detailed analysis shows that Eq. (20) is satisfied for two possible cases.

(1) The first one requires that $\hat{\mathbf{h}}_0 \cdot \hat{\mathbf{h}}_1 = \pm 1$. This is equivalent to ask $\hat{\mathbf{h}}_0 \times \hat{\mathbf{h}}_1 = 0$. Since $[H_0, H_1] = -3i h_0 h_1 (\hat{\mathbf{h}}_0 \times \hat{\mathbf{h}}_1) \cdot \hat{e}_z \sigma_z$, the condition is equivalent to $[H_0, H_1] = 0$.

(2) The second case is $\hat{\mathbf{h}}_0 \cdot \hat{\mathbf{h}}_1 \neq \pm 1$, which is equivalent to $[H_0, H_1] \neq 0$. However, in this case, it is required the extra condition $\cos(\tau h_1) \cos(\tau h_0) = \pm 1$.

As we will see later on, the first case $\hat{\mathbf{h}}_0 \cdot \hat{\mathbf{h}}_1 = \pm 1$ gives rise to edge states, which are flat bands that join a kind of Weyl nodes with opposite Berry phase. They can emerge for small strain's amplitudes. Although the second case $\hat{\mathbf{h}}_0 \cdot \hat{\mathbf{h}}_1 \neq \pm 1$ also hosts edge states, such states are no longer flat bands, instead their quasienergy varies with k_x . Unfortunately, the last kind of edge states emerge for big strain amplitude, which make them hard to be observed. As a consequence, we will find the location of such second case points, but we will focus only on the topological modes resulting from the first kind of touching band points.

A. Touching band points for $\hat{\mathbf{h}}_0 \cdot \hat{\mathbf{h}}_1 = \pm 1$

From Eq. (18), we find that $\hat{\mathbf{h}}_0 \cdot \hat{\mathbf{h}}_1 = \pm 1$ only if $k_x^* = \pi/\sqrt{3}$ or $k_x^* = 0, \pm 2\pi/3$. It can be proved that the solution for $k_x^* = \pi/\sqrt{3}$ is contained in the ones for $k_y^* = 0, \pm 2\pi/3$. Thus we only analyze the cases $k_y^* = 0, \pm 2\pi/3$. By substituting k_y^* into Eq. (18),

$$\tau\omega_{\pm}(k_x) = \tau(1 + \lambda/2) \pm 2\tau(1 - \lambda) \cos(\sqrt{3}k_x/2), \quad (21)$$

where the “+” sign stems for $k_y = 0$ and the “-” sign for $k_y = \pm 2\pi/3$. Now we require the condition $\tau\omega_{\pm}(k_x) = n\pi$ (with n an integer number) in Eq. (21) at a special $k_x = k_x^*$. This gives two possible values for k_x^* ,

$$\begin{aligned} k_x^{*(+)} &= \pm \frac{2}{\sqrt{3}} \arccos \left[\frac{n\pi/\tau - (1 + \lambda/2)}{2(1 - \lambda)} \right], \\ k_x^{*(-)} &= \pm \frac{2}{\sqrt{3}} \arccos \left[\frac{-n\pi/\tau + (1 + \lambda/2)}{2(1 - \lambda)} \right]. \end{aligned} \quad (22)$$

As before, $k_x^{*(+)}$ stems for $k_y^* = 0$ and $k_x^{*(-)}$ for $k_y^* = \pm 2\pi/3$. Note that Eq. (22), for a given n , has two different solutions for $k_x^{*(+)}$ and four solutions for $k_x^{*(-)}$. It is noteworthy that since the cosine function is bounded, such solutions will exist and be real if and only if

$$\left| \frac{n\pi/\tau - (\lambda + 1/2)}{2(1 - \lambda)} \right| \leq 1. \quad (23)$$

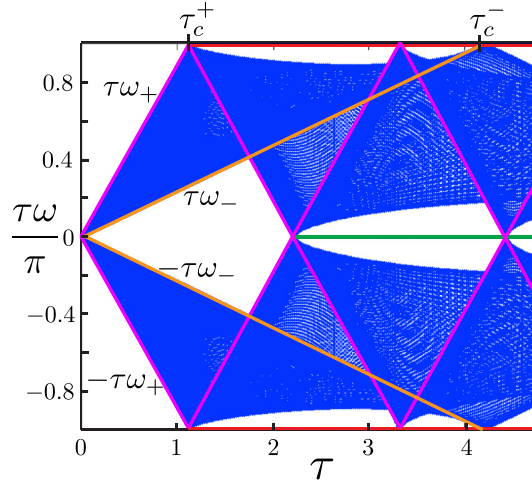


FIG. 6. Band edges of the quasienergy spectrum as a function of τ , calculated using the same conditions as in Fig. 2. The upper limits are indicated by pink solid lines and labeled by $\pm\tau\omega_+$, whereas the lower limits are shown by orange solid lines and labeled by $\pm\tau\omega_-$. Both limits, $\pm\tau\omega_+$ and $\pm\tau\omega_-$, were found from Eq. (21). The limits touch each other at $\tau_c = n\tau_c^+$ or $\tau_c = n\tau_c^-$ as indicated. It is clear that edge states emerge when two different bands touch each other, therefore, these states have a Shockley like nature [38,53–55].

From the previous equation, we can obtain the minimum or critical value of τ for having touching band points at $\tau\omega = \pm n\pi$. Since we are looking for the minimum value of τ needed to have touching band points, it is enough to consider the equality in Eq. (23). If τ_c is the value at which the equality in Eq. (23) is held, we have that

$$\frac{n\pi/\tau_c \pm (\lambda + 1/2)}{2(1 - \lambda)} = \mp 1. \quad (24)$$

Two kinds of critical values of τ_c are obtained. Either $\tau_c = n\tau_c^+$ or $\tau_c = n\tau_c^-$, with

$$\tau_c^+ = \frac{2\pi}{3(2 - \lambda)} \quad (25)$$

and

$$\tau_c^- = \frac{2\pi}{|5\lambda - 2|}. \quad (26)$$

Now we explain why there are two critical values of τ . Basically, $n\tau_c^+$ gives the touching band points that arise from the crossings between $\pm\tau\omega_+(k_x)$, as indicated in Fig. 6 for the quasienergy spectrum as a function of τ for λ fixed and $k_x = 0$. It is important to say that whenever τ reaches a critical value $n\tau_c^+$, a new pair of touching band points appear. Notice that this argument explains the shape of the plot presented for the numerical results of Fig. 2. From Figs. 2 and 6, is clear that edge states emerge when two different bands touch each other. These states have a Shockley-like nature [38,53–55].

In a similar way, if τ is increased from zero, the quasienergies $\pm\tau\omega_-(k_x)$ will reach the edges of the Floquet space. This will happen at τ_c^- , where $\tau_c^- > \tau_c^+$, see Fig. 6. As before, if τ increases up to $2\tau_c^-$, then $\tau\omega_-$ and $-\tau\omega_-$ will touch each other at zero quasienergy. New touching band points will appear each time that τ reaches $n\tau_c^-$.

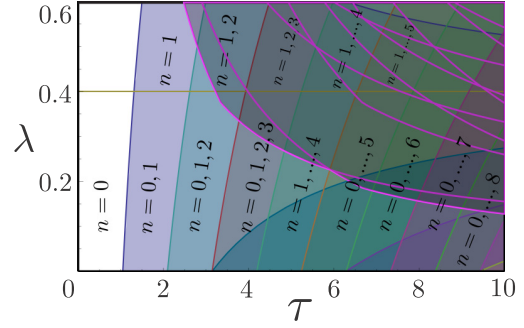


FIG. 7. Topological phase diagram, where the colors indicate regions of different maximal allowed n . Here the number of topological nontrivial edge states increases with n . The phase boundaries are determined from Eq. (25) and Eq. (26), using $\tau = n\tau_c^+$ and $\tau = n\tau_c^-$. The shaded region with magenta lines corresponds to nonflat band phases given by the condition $\hat{\mathbf{h}}_0 \cdot \hat{\mathbf{h}}_1 \neq 1$. Phases with $\lambda < 0.4$, as indicated by the horizontal line, are nongapped at zero quasienergy for $\tau < 2\tau_c^+$.

Therefore the number of pairs of touching band points will depend upon τ and λ . By plotting Eq. (23) for different values of n , the phase diagram of the system can be built. In Fig. 7, such diagram is displayed. Therein, each color represents a phase of the system with the indicated allowed values of n . For instance, for $\lambda \leq 0.4$, the white color indicates just two pairs of touching band points, since only one value of n is allowed. On the other hand, for the violet color and $\lambda \leq 0.4$, there are two touching band points pairs since $n = 0, 1$, or in other words, there are two allowed values for n .

Up to now, we have found the location of touching band points at $\tau\omega(k_x^*, k_y^*) = \pm n\pi$, but a more detailed analysis is needed since two cases are of great interest. Firstly, the case $n = 0$, which give rise to touching band points at zero quasienergy at any value of τ , suggesting that such points have a time-independent origin. Secondly, $n \neq 0$, i.e., touching band points at zero or $\pm\pi$ quasienergy. The emergence of such points depend upon the value of τ and λ as can be seen in Fig. 7.

First, we will study *time-independent touching band points*. By setting $n = 0$ in Eq. (22), we obtain

$$k_x^{*(-)} = \pm \frac{2}{\sqrt{3}} \arccos \left[\frac{1 + \lambda/2}{2(1 - \lambda)} \right]. \quad (27)$$

Therefore there are two touching band points pairs for $n = 0$, one pair for each value of k_y^* , both located at $\pm k_x^*$. Moreover, from Eq. (27), we found that these points are Dirac cones shifted from their original position due to the strain field. As we will see in the next section, this kind of touching band points will give rise to flat bands if the system is considered to be finite. For illustrating purposes, in Figs. 8 and 9, we present the band structure obtained using the analytical effective Hamiltonian quasienergies given by Eq. (18). Therein the Dirac cones for $n = 0$ are indicated by yellow points.

It is important to say that Dirac cones undergo a phase transition as λ is increased in the time-independent case. For $\lambda < \lambda_C = 0.4$, there are two Dirac cones, indicated in Fig. 7 by a horizontal line at λ_C . When λ reaches λ_C , the Dirac cones

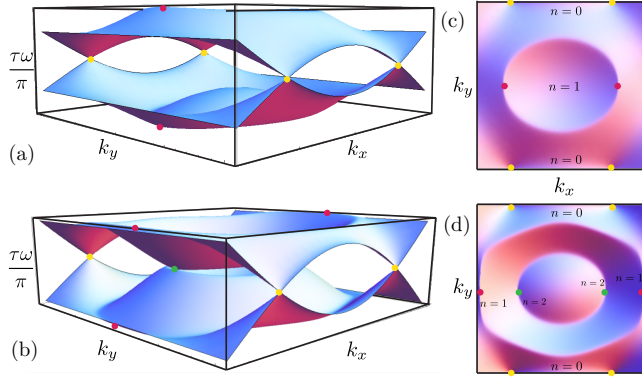


FIG. 8. (Left) Band structure obtained using the analytical effective Hamiltonian quasienergies given by Eq. (18) for (a) $\tau = 1.5\tau_c^+$ and (b) $\tau = 2.5\tau_c^+$ using $\lambda = 0.1$. On the right, in (c) and (d), we show upper views of the same band structures. Therein, the touching band points are clearly seen. In (c), corresponding to $\tau = 1.5\tau_c^+$ there are two touching band points for $\tau\omega = 0$ and another pair at $\tau\omega = \pm\pi$, which are denoted by yellow and red dots, respectively. As is proven in the main text, the yellow dots are Dirac cones vertices, which have a time-independent origin. On the other hand, red touching band points have a time-dependent origin. For $\tau = 2.5\tau_c^+$ [see (b)], the touching band points are at $\tau\omega = 0$ (label $n = 2$) and at $\tau\omega = \pm\pi$ (label $n = 1$). The Dirac vertices remain the same as in (a), corresponding to $n = 0$.

merge at a single point and, finally, for $\lambda > \lambda_C$ the energy spectrum becomes gapped.

Here we are interested just in $\lambda \ll \lambda_C$, hence the gap opening is far away from this limit. Additionally, our system cannot become gapped since for $\tau \geq 2\tau_c^+$, touching band

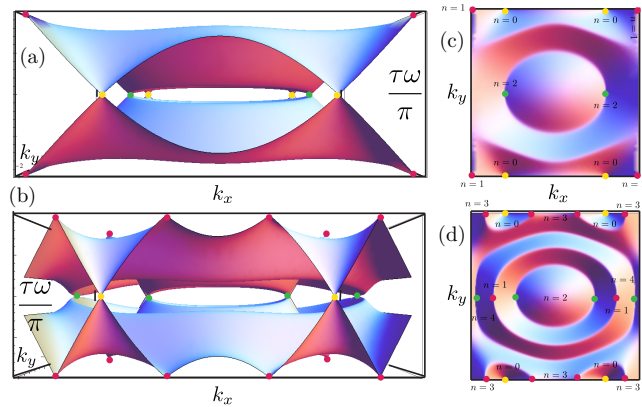


FIG. 9. (Left) Band structure obtained using the analytical effective Hamiltonian quasienergies given by Eq. (18) for (a) $\tau = 3$ and (b) $\tau = 5.28$ using the same conditions as in Fig. 8, $\lambda = 0.1$. On the right panel, upper views of the same band structure are shown. Note that in (a), we have $\tau < \tau_c^-$, therefore there are two pairs of touching band points at $\pm\pi$ quasienergy. On the other hand, in (b), we have $\tau > \tau_c^-$ and two new pairs of touching band points appear at quasienergy $\pm\pi$, see main text. The parameters used for making this plot are the same as those used in Figs. 3 and 4, in which a numerical diagonalization of the Hamiltonian was performed. This plot confirms that the numerical and analytical calculations are in excellent agreement.

points will emerge at zero quasienergy, avoiding the opening of a full gap.

Second, we study the *time-dependent touching band points* ($n \neq 0$). Two different types of touching band points emerge depending on the value of n . Since for touching band points we have that $\tau\omega(k_x^*, k_y^*) = n\pi$, it follows that $\mathcal{U}(k_x^*, k_y^*, \tau) = (-1)^n$. For odd n , we have $\mathcal{U}(k_x^*, k_y^*) = -1$, this means that, due to the Floquet periodicity, touching band points at $\pm n\pi$ quasienergy (n being an odd integer) are equivalent to touching band points at $\pm\pi$ quasienergy. Similarly, for even n we have $\mathcal{U}(k_x^*, k_y^*) = 1$, which implies that touching band points at $\pm n\pi$ quasienergy (n being an even integer) are equivalent to touching band points at zero quasienergy. In Figs. 8 and 9, we labeled touching band points for odd n by red dots, whereas touching band points for even n are labeled by green points. The touching band points always come in pairs for a given value of n , as can be inferred from Eq. (22). These different kinds of points lead to different edge states as indicated in Figs. 3 and 4. Therein, green flat bands result from joining a pair of touching band points for even n . Red flat bands join pairs of odd n touching band points.

B. Touching band points for $\hat{\mathbf{h}}_0 \cdot \hat{\mathbf{h}}_1 \neq \pm 1$

Let us start by finding the location of these kind of touching band points. We first set $\tau h_1 = m_1\pi$ and $\tau h_0 = n_1\pi$, where m_1 and n_1 are integer numbers. Then, after some algebraic operations, one gets

$$k_y^* = \frac{2}{3} \cos^{-1} \left[\frac{\frac{\pi^2 n_1^2}{6\tau^2} - \frac{m_1^2 \pi^2}{6\tau^2 \lambda^2} - \frac{1}{8}}{\sqrt{\frac{\pi^2}{3\tau^2} \left(\frac{m_1^2}{2\lambda^2} + \frac{n_1^2}{4} \right) - \frac{1}{8}}} \right],$$

$$k_x^* = \frac{2}{\sqrt{3}} \cos^{-1} \left[\sqrt{\frac{\pi^2}{3\tau^2} \left(\frac{m_1^2}{2\lambda^2} + \frac{n_1^2}{4} \right) - \frac{1}{8}} \right]. \quad (28)$$

In order to have real-valued k_x^* and k_y^* , the following conditions must be fulfilled altogether:

$$0 \leq \frac{\pi^2}{3\tau^2} \left(\frac{m_1^2}{2\lambda^2} + \frac{n_1^2}{4} \right) - \frac{1}{8} \leq 1,$$

$$\left| \frac{\frac{\pi^2 n_1^2}{6\tau^2} - \frac{m_1^2 \pi^2}{6\tau^2 \lambda^2} - \frac{1}{8}}{\sqrt{\frac{\pi^2}{3\tau^2} \left(\frac{m_1^2}{2\lambda^2} + \frac{n_1^2}{4} \right) - \frac{1}{8}}} \right| \leq 1. \quad (29)$$

Therefore the phase diagram shown in Fig. 7 has to be modified, since the previous constrictions add new phases to the system. In the phase diagram shown in Fig. 7, these new phases appear in the shadowed area. The different phases are separated by the magenta curves. However, such values of strain are difficult to achieve so in the present work we skip the analysis of their topological properties.

VI. TOPOLOGICAL NATURE OF EDGE STATES

The topological characterization of the flat bands for $\hat{\mathbf{h}}_0 \cdot \hat{\mathbf{h}}_1 = \pm 1$ will be done in this section. To do that, we will calculate the Berry phase around the touching band points

found before. The Berry phase is defined as

$$\gamma_C = \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{k}, \quad (30)$$

where $\mathbf{A} = -i \langle \psi_k | \nabla_k | \psi_k \rangle$ is the so-called Berry connection (a gauge invariant quantity), and $\nabla_k = (\partial_{k_x}, \partial_{k_y})$ is the gradient operator in the momentum space. We follow a four steps method to calculate such quantity. First, we note that exactly at the touching band points with $\hat{\mathbf{h}}_0 \cdot \hat{\mathbf{h}}_1 = \pm 1$, commutator (15) vanishes. This means that near the touching band points $[H_1, H_0] \approx 0$, so we can approximate the time evolution operator Eq. (14) as

$$\mathcal{U}(k_x, k_y, \tau) \approx \exp \{-i\tau(H_1 + H_0) + \tau^2[H_1, H_0]/2\}, \quad (31)$$

where we used the Baker-Campbell-Hausdorff formula keeping terms up to order τ^2 . The second step is to expand $\mathcal{U}(k_x, k_y, \tau)$ around the neighborhood of touching band points, i.e., we calculate the Taylor series of $\mathcal{U}(k_x, k_y, \tau)$ around $k_x = k_x^*$ and $k_y = k_y^*$.

After some algebraic manipulations, we obtain

$$\mathcal{U}(q_x, q_y, \tau) \approx \exp[-ih_T \hat{\mathbf{h}}_T \cdot \sigma], \quad (32)$$

where

$$\mathbf{h}_T = A(\lambda, \tau) q_x \hat{\mathbf{e}}_x + B(\lambda, \tau) q_y \hat{\mathbf{e}}_y + C(\lambda, \tau) q_y \hat{\mathbf{e}}_z, \quad (33)$$

with $q_x = k_x - k_x^*$, $q_y = k_y - k_y^*$, $\hat{\mathbf{h}}_T = \mathbf{h}_T/h_T$, $h_T = |\mathbf{h}_T|$, and

$$\begin{aligned} A(\lambda, \tau) &= n\pi + \sqrt{3}(\lambda - 1)\tau \sqrt{1 + \frac{(1 + \lambda/2 - n\pi/\tau)^2}{4(\lambda - 1)^2}}, \\ B(\lambda, \tau) &= \frac{3}{4}(2 + \lambda)\tau, \\ C(\lambda, \tau) &= \frac{9\lambda\tau[(2 + \lambda)\tau - 2n\pi]}{8(\lambda - 1)}. \end{aligned} \quad (34)$$

The topological properties of the system around the touching band points are given by the approximated effective Hamiltonian $\hat{\mathbf{h}}_T \cdot \sigma$. To see that, note that near the touching band points $h_T \approx \pm n\pi$, the time evolution operator Eq. (32) can be expanded as

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(q_x, q_y, \tau) &= \cos(h_T) - i(\hat{\mathbf{h}}_T \cdot \sigma) \sin h_T \\ &\approx \mathbf{1} - h_T(\hat{\mathbf{h}}_T \cdot \sigma). \end{aligned} \quad (35)$$

Hence all the topological features of the system will be given by $(\hat{\mathbf{h}}_T \cdot \sigma)$. The third step is to find the eigenvectors of $(\hat{\mathbf{h}}_T \cdot \sigma)$. It can be proven that they are given by the following spinors:

$$\begin{aligned} |\psi_{q'}^\uparrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \frac{C q'_y}{B h_T}} \\ e^{i\xi\alpha_{q'}} \sqrt{1 - \frac{C q'_y}{B h_T}} \end{pmatrix}, \\ |\psi_{q'}^\downarrow\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\xi\alpha_{q'}} \sqrt{1 - \frac{C q'_y}{B h_T}} \\ -\sqrt{1 + \frac{C q'_y}{B h_T}} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (36)$$

where ξ can take the values $\xi = +1$ which corresponds to $+k_x^*$ and $\xi = -1$ to $-k_x^*$. We have used a new set of variables

defined by

$$\begin{aligned} q'_x &= q_x/A, \\ q'_y &= q_y/B, \end{aligned} \quad (37)$$

and $\alpha_{q'}$ is given by

$$\alpha_{q'} = \tan^{-1} \left(\frac{q'_y}{q'_x} \right). \quad (38)$$

The four step is to compute the Berry phase directly from the definition, Eq. (30). We start by calculating the Berry connection for $\xi = 1$. We obtain that

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{C}{B h_T} q'_y \right) \nabla_{q'} \alpha_{q'}, \quad (39)$$

where

$$\nabla_{q'} \alpha_{q'} = \frac{-q'_y \hat{\mathbf{e}}_x + q'_x \hat{\mathbf{e}}_y}{(q'_x)^2 + (q'_y)^2}. \quad (40)$$

Finally, we just calculate the Berry phase along a circumference centered at $q'_x = q'_y = 0$. By using polar coordinates, $q'_x = q' \cos \theta$ and $q'_y = q' \sin \theta$ where $(q')^2 = (q'_x)^2 + (q'_y)^2$, we obtain

$$\begin{aligned} \gamma_C &= \int_0^{2\pi} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{q}' \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \left(1 - \frac{\frac{C}{B} \sin \theta}{\sqrt{1 + \frac{C^2}{B^2} \sin^2 \theta}} \right) d\theta = \pi. \end{aligned} \quad (41)$$

A similar calculation can be done for $\xi = -1$, which gives $\gamma_C = -\pi$. Now the origin of the flat bands is clear, as they have a similar origin as for flat bands on Weyl semimetals, i.e., they are Fermi arcs which join two inequivalent Dirac cones with opposite Berry phase. However, for the special cases of resonant driving $\tau = n\tau_c^+$, there is always one touching point at $k_x^* = 0$ and $k_y^* = 0, \pm 2\pi/3$. It has 0 or $\pm\pi$ quasienergy depending on n (with $n \neq 0$). At this point, the Berry phase is equal to zero. If we increase τ by a small amount, such point splits in two touching band points with opposite Berry phase. Hence, if the considered system is finite, an edge state joining such points will emerge, as it happens in pristine graphene nanoribbons or in Weyl semimetals. For the particular case $n = 0$, touching band points are the same as in the time-independent case, thus their topological properties are the same as in zigzag graphene nanoribbons, namely, a flat band joining two inequivalent Dirac cones with opposite Berry phase emerges [23,57]. Although commutator (15) is zero at the touching band points studied here, away from such points, commutator (15) is no longer zero but proportional to σ_z , in other words, a masslike term appears and a gap between touching band points is open.

Finally, the range where edge states will emerge can be inferred from Eqs. (21) and (22), for $n = 0$ is given by $|k_x| \geq k_x^{*(-)}$. For edge states with $n \neq 0$, the interval where they appear in momentum space is given by the intersection of the solutions of $|k_x| \leq k_x^{*(+)}$ and $|k_x| \leq k_x^{*(-)}$. Then, we can create touching band points just by increasing the period of the driving τ . In the next section, we will discuss the experimental feasibility of the model studied here.

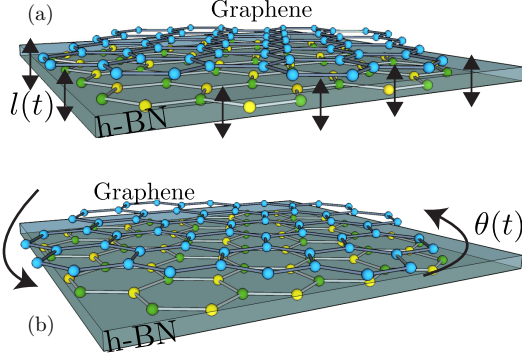


FIG. 10. Experiments proposed to observe topological flat bands in strained ZGN. As is shown, this can be achieved by placing a graphene monolayer over hexagonal boron nitride (h-BN). Then, the substrate can be moved up and down (a) or twisted (b) via a fast motor.

VII. EXPERIMENTAL FEASIBILITY

In this section, we discuss the experimental feasibility of our model. We start by making a numerical estimation of the kicking frequency needed to observe the results obtained here. From Eq. (25), the critical value of the driving period at which topological flat bands emerge is

$$T = \frac{2\pi\hbar n}{3(2-\lambda)}. \quad (42)$$

By introducing the numerical values, we obtain a driving period of $T \approx n \times 10^{-16}$ s. This kicking period is too small to be applied, however, it grows with n , so for $n = 10$, we have $T \approx 10^{-15}$ s. To observe this kind of effect, some experiments can be proposed. The first kind that one can imagine is to apply a time-dependent stress at the boundaries of the graphene membrane. Unfortunately, this experiment will not be able to discern the proposed effects, since stress is transmitted within graphene by phonons, which have a frequency very close to the proposed kicking frequency. This kind of experiment does not exhaust the options. We propose two different kinds of experiments to achieve such driving period. They are shown in Fig. 10, the first one, panel (a), consists of a graphene monolayer above an hexagonal boron nitride (h-BN) substrate, the substrate can be moved up and down by using different kinds of fast devices. In Fig. 10(a), the distance between graphene and h-BN, denoted by $l(t)$, is time-dependent. Similarly, the h-BN can be periodically twisted by an angle $\theta(t)$, as is shown in Fig. 10(b). The advantages of these experiments is that the strain field is applied at the same time at all lattices sites, and thus phonons are not needed to produce the strain field.

On the other hand, the delta kicking can be hard to be experimentally realized. Let us consider a more realistic kind of driving: harmonic driving. In particular, we chose a cosine time modulation given by

$$\begin{aligned} \gamma_j(t) = & \gamma_0 + \cos(\Omega t)\gamma_0\lambda\xi(j+1) \\ & \times \sin[\pi\sigma\xi(j)]\sin(2\pi\sigma j + \phi). \end{aligned} \quad (43)$$

Then, we can write the time-dependent Hamiltonian of the system as

$$H(t) = H_0 + \cos(\Omega t)H_1, \quad (44)$$

where

$$\begin{aligned} H_0 = & \gamma_0 \sum_{j=1}^{N-1} [a_{2j+1}^\dagger b_{2j} + c(k_x) a_{2j-1}^\dagger b_{2j}] + \text{H.c.}, \\ H_1 = & \sum_{j=1}^{N-1} [\delta\gamma_{2j} a_{2j+1}^\dagger b_{2j} + c(k_x) \delta\gamma_{2j-1} a_{2j-1}^\dagger b_{2j}] \\ & + \text{H.c.}, \end{aligned} \quad (45)$$

where $\delta\gamma_j = \gamma_j - \gamma_0$, see Eq. (10). Since $H(t+T) = H(t)$ (here $T = 2\pi/\Omega$), the Floquet theorem indicates that the wave functions of $H(t)$ can be written in terms of the fundamental frequency Ω as

$$|\psi_{n,j}(\mathbf{k}, t)\rangle = e^{-i\epsilon_n(\mathbf{k})t/\hbar} \sum_{m=-\infty}^{\infty} |\varphi_{n,j}^{(m)}\rangle e^{im\Omega t}, \quad (46)$$

where the coefficients $|\varphi_{n,j}^{(m)}\rangle$ at site j satisfy the time-independent Schrödinger equation [58],

$$\sum_{j', m'} \mathcal{H}_{j,j'}^{m,m'} |\varphi_{n,j'}^{(m')}\rangle = \epsilon_n |\varphi_{n,j}^{(m)}\rangle, \quad (47)$$

where \mathcal{H} , called the Floquet Hamiltonian, is given by

$$\mathcal{H}_{j,j'}^{m,m'} = m\Omega \delta_{m,m'} + \frac{1}{T} \int_0^T e^{-i(m-m')\Omega t} H(t) dt. \quad (48)$$

Note that Eq. (47) has solutions for each value of \mathbf{k} all over $-\infty \leq \epsilon_n \leq \infty$. For our purposes, it is enough to consider just the first Brillouin zone of the Floquet space, i.e., $-\pi \leq \tau\epsilon_n \leq \pi$, with $\tau = T/\hbar$.

For a Hamiltonian given by Eq. (44), the Floquet Hamiltonian, Eq. (48), has a block trigonal form [58], where each block is a $N \times N$ matrix. As a first approximation, the quasienergy spectrum is well described by considering [58] $-1 \leq m \leq 1$. In Fig. 11, we present the quasienergy spectrum of $\mathcal{H}_{j,j'}^{m,m'}$ for $-1 \leq m \leq 1$, $\lambda = 0.1$, $\tau = 3$, $\sigma = 1/2$, $\phi = 4\pi\sigma/3$, and $N = 240$, calculated using fixed boundary conditions. As can be seen, time-independent flat bands still emerge at zero quasienergy, but the time-dependent flat bands at zero quasienergy are almost within the bulk spectrum (see Fig. 11, where such states are indicated by solid green lines). However, edge states at the edges of the first Brillouin zone of the Floquet space are still emerging, but they are no longer flat bands, in fact they have a small curvature as can be seen in Fig. 11, where such edge states are labeled by solid red lines. From the numerical results it seems that the gap that separates edge states from the bulk tends to be reduced by introducing a cosine modulation. To clarify that point let us make a comparison between the gaps that separate flat bands from the bulk states for delta and harmonic driving. We chose edge states around $\pm\pi$ quasienergy since for these states there is a well defined gap. At $k_x = 0$, the gap is $\Delta \approx 0.1$ eV for the delta-kicking and $\Delta \approx 0.05$ eV for the harmonic driving. This means that the gap obtained for the delta kicking is twice the one obtained for cosine kicking. Therefore, for the harmonic driving, the

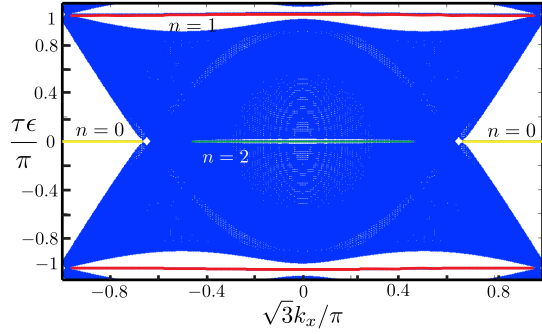


FIG. 11. Quasienergy spectrum obtained from Eq. (48) using $\tau = 3$, $\lambda = 0.1$, $\sigma = 1/2$, $\phi = 4\pi\sigma/3$, and $N = 240$ using fixed boundary conditions. Edge states for $n = 0$ (time-independent edge modes at zero quasienergy) are indicated by solid yellow lines, whereas time-dependent edge states for $\tau\epsilon = \pm\pi$ ($\tau\epsilon = 0$) are represented by solid red (green) lines. Note that the gaps separating time dependent edge states are smaller than the ones obtained by using a delta kicking, see Fig. 3. In addition, edge states, at $\pm\pi$ quasienergy, are no longer flat bands but dispersive edge modes.

experimental observation of edge states is harder. Even in the worst scenery, where the experiments proposed cannot be achieved, artificial lattices are good candidates for the experimental realization of our model, since in such lattices the hopping parameters can be tuned at will [59–64]. Also, there is a recent proposal to use light to induce strain in graphene [22], which is in the order of the required time-deformation driving.

VIII. CONCLUSIONS

We have found topological nontrivial flat bands in time periodically driven strained graphene within the Floquet approach and in the limit of small strain's amplitude. This result was obtained using analytical calculations and compared with numerical calculations. An excellent agreement was found between them. Flat bands were understood as a kind of Fermi arcs joining nodal points (points at which the quasienergy spectrum takes zero or $\pm\pi$ values). Such points were characterized and have found to possess opposite Berry phases, which explains the emergence of flat bands between them. Moreover, our model provides a very simple picture about the emergence of such kind of flat bands in more complicated models and gives a very simple way to count the number of flat bands. Additionally, the experimental feasibility of the model was discussed and a more realistic time perturbation was studied. We found that, in the presence of a more realistic sinusoidal time perturbation, the main results of the paper are not modified: we still found edge states at zero and $\pm\pi$ quasienergy, although they are no longer flat bands. In addition, the gap that separates edge states from bulk states is bigger when a delta kicking driving is applied. In fact, the gap for harmonic driving is reduced almost to a half of the gap observed in delta driving.

ACKNOWLEDGMENTS

This project was supported by DGAPA-PAPIIT Project No. 102717. P. R.-T. acknowledges financial support from Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) (México).

APPENDIX

First of all, let us calculate the commutator between H_1 and H_0 given by Eq. (12). We have

$$\begin{aligned} [H_1, H_0] &= [h_1^{(x)}\sigma_x + h_1^{(y)}\sigma_y, h_0^{(x)}\sigma_x + h_0^{(y)}\sigma_y] \\ &= h_0^{(y)}h_1^{(x)}[\sigma_x, \sigma_y] + h_0^{(x)}h_1^{(y)}[\sigma_y, \sigma_x] \\ &= 2i(h_0^{(y)}h_1^{(x)} - h_1^{(y)}h_0^{(x)})\sigma_z \\ &= -6i\lambda \sin(3k_y/2) \cos(\sqrt{3}k_x/2)\sigma_z. \end{aligned} \quad (\text{A1})$$

Even though H_1 and H_0 do not commute, we can write equation (8) as

$$U(k_x, k_y, \tau) = \exp[-i\tau H_{\text{eff}}(k_x, k_y)]. \quad (\text{A2})$$

To do that, we will use the addition rule of SU(2), namely,

$$e^{ia(\hat{n}\cdot\sigma)} e^{ib(\hat{m}\cdot\sigma)} = e^{-ic(\hat{g}\cdot\sigma)}. \quad (\text{A3})$$

Here,

$$\cos c = \cos a \cos b - \hat{n} \cdot \hat{m} \sin a \sin b \quad (\text{A4})$$

and

$$\hat{g} = \frac{1}{\sin c} (\hat{n} \sin a \cos b + \hat{m} \sin b \cos a - \hat{n} \times \hat{m} \sin a \sin b). \quad (\text{A5})$$

In our case, we have that the Hamiltonians H_1 and H_0 can be written as

$$\begin{aligned} H_0(k_x, k_y) &= h_0(k_x, k_y) \hat{\mathbf{h}}_0 \cdot \sigma, \\ H_1(k_x, k_y) &= h_1(k_x, k_y) \hat{\mathbf{h}}_1 \cdot \sigma, \end{aligned} \quad (\text{A6})$$

where

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{h}}_0 &= \frac{1}{h_0} (h_0^{(x)}(k_x, k_y) \hat{e}_x + h_0^{(y)}(k_x, k_y) \hat{e}_y), \\ \hat{\mathbf{h}}_1 &= \frac{1}{h_1} (h_1^{(x)}(k_x, k_y) \hat{e}_x + h_1^{(y)}(k_x, k_y) \hat{e}_y), \end{aligned} \quad (\text{A7})$$

and

$$\begin{aligned} h_0 &= |\mathbf{h}_0(k_x, k_y)| = \sqrt{(h_0^{(x)})^2 + (h_0^{(y)})^2}, \\ h_1 &= |\mathbf{h}_1(k_x, k_y)| = \sqrt{(h_1^{(x)})^2 + (h_1^{(y)})^2}, \end{aligned} \quad (\text{A8})$$

where we have not written the explicit dependence on k_x and k_y of h_0 , h_1 , \mathbf{h}_0 , and \mathbf{h}_1 for the sake of simplicity.

Now, using the last part of equation (A3), the time evolution operator Eq. (8) takes the following form:

$$U(k_x, k_y, \tau) = e^{-ia\tau(\hat{\mathbf{h}}_1\cdot\sigma)} e^{-ib\tau(\hat{\mathbf{h}}_0\cdot\sigma)} = e^{-i\omega\tau(\hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}\cdot\sigma)}. \quad (\text{A9})$$

As we can see, by using the addition rule of SU(2) the time evolution operator is diagonalized. The quasienergies can be obtained from Eq. (A4) and are given by

$$\begin{aligned} \cos[\tau\omega(k_x, k_y)] &= \cos(\tau h_0) \cos(\tau h_1) \\ &\quad - \hat{\mathbf{h}}_1 \cdot \hat{\mathbf{h}}_0 \sin(\tau h_0) \sin(\tau h_1), \end{aligned} \quad (\text{A10})$$

where

$$\hat{\mathbf{h}}_1 \cdot \hat{\mathbf{h}}_0 = \frac{\lambda}{h_0 h_1} [-4 \cos^2(\sqrt{3}k_x/2)] + \frac{\lambda}{h_0 h_1} \left[-\cos(\sqrt{3}k_x/2) \cos\left(\frac{3k_y}{2}\right) + \frac{1}{2} \right]. \quad (\text{A11})$$

The unit vector $\hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}$ can be obtained from Eq. (A5), we have

$$\hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}} = -\frac{1}{\sin(\tau\omega)} [\hat{\mathbf{h}}_1 \sin(\tau h_1) \cos(\tau h_0)]$$

$$-\frac{1}{\sin(\tau\omega)} [\hat{\mathbf{h}}_0 \sin(\tau h_0) \cos(\tau h_1)] - \frac{1}{\sin(\tau\omega)} [\hat{\mathbf{h}}_1 \times \hat{\mathbf{h}}_0 \sin(\tau h_1) \sin(\tau h_0)] \quad (\text{A12})$$

with

$$\hat{\mathbf{h}}_1 \times \hat{\mathbf{h}}_0 = \frac{3\lambda}{h_0 h_1} [\sin(3k_y/2) \cos(\sqrt{3}k_x/2)] \hat{e}_z. \quad (\text{A13})$$

Finally, the effective Hamiltonian is

$$H_{\text{eff}}(k_x, k_y) = \omega(k_x, k_y) \hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (\text{A14})$$

-
- [1] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, *Science* **321**, 385 (2008).
- [2] V. M. Pereira, A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres, *Phys. Rev. B* **80**, 045401 (2009).
- [3] V. M. Pereira and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 046801 (2009).
- [4] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **88**, 085430 (2013).
- [5] P. Roman-Taboada and G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **90**, 195435 (2014).
- [6] A. Catuneanu, H.-S. Kim, O. Can, and H.-Y. Kee, *Phys. Rev. B* **94**, 121118(R) (2016).
- [7] G. G. Naumis and P. Roman-Taboada, *Phys. Rev. B* **89**, 241404 (2014).
- [8] P. Roman-Taboada and G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **92**, 035406 (2015).
- [9] P. Dietl, F. Piéchon, and G. Montambaux, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 236405 (2008).
- [10] G. Montambaux, F. Piéchon, J.-N. Fuchs, and M. O. Goerbig, *Phys. Rev. B* **80**, 153412 (2009).
- [11] J. Feilhauer, W. Apel, and L. Schweitzer, *Phys. Rev. B* **92**, 245424 (2015).
- [12] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, *2D Materials* **2**, 025001 (2015).
- [13] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, *J. Phys.: Condens. Matter* **26**, 125302 (2014).
- [14] D. Babajanov, D. U. Matrasulov, and R. Egger, *Eur. Phys. J. B* **87**, 258 (2014).
- [15] T. Mishra, T. G. Sarkar, and J. N. Bandyopadhyay, *Eur. Phys. J. B* **88**, 231 (2015).
- [16] A. Agarwala, U. Bhattacharya, A. Dutta, and D. Sen, *Phys. Rev. B* **93**, 174301 (2016).
- [17] R. Carrillo-Bastos, C. León, D. Faria, A. Latgé, E. Y. Andrei, and N. Sandler, *Phys. Rev. B* **94**, 125422 (2016).
- [18] F. Guinea, *Solid State Commun.* **152**, 1437 (2012).
- [19] G.-X. Ni, H.-Z. Yang, W. Ji, S.-J. Baeck, C.-T. Toh, J.-H. Ahn, V. M. Pereira, and B. zyilmaz, *Adv. Mater.* **26**, 1081 (2014).
- [20] C. Si, Z. Sun, and F. Liu, *Nanoscale* **8**, 3207 (2016).
- [21] B. Amorim, A. Cortijo, F. de Juan, A. Grushin, F. Guinea, A. Gutierrez-Rubio, H. Ochoa, V. Parente, R. Roldn, P. San-Jose, J. Schiefele, M. Sturla, and M. Vozmediano, *Phys. Rep.* **617**, 1 (2016).
- [22] M. M. Salary, S. Inampudi, K. Zhang, E. B. Tadmor, and H. Mosallaei, *Phys. Rev. B* **94**, 235403 (2016).
- [23] T. T. Heikkilä, N. B. Kopnin, and G. E. Volovik, *JETP Lett.* **94**, 233 (2011).
- [24] G. E. Volovik, *The Universe in a Helium Droplet* (Clarendon, Oxford University Press, New York, 2003).
- [25] G. E. Volovik, *J. Supercond. Novel Magnetism* **26**, 2887 (2013).
- [26] S. Rao, *J. Indian Inst. Sci.* **96**, 145 (2016).
- [27] S.-Y. Xu, I. Belopolski, N. Alidoust, M. Neupane, G. Bian, C. Zhang, R. Sankar, G. Chang, Z. Yuan, C.-C. Lee, S.-M. Huang, H. Zheng, J. Ma, D. S. Sanchez, B. Wang, A. Bansil, F. Chou, P. P. Shibayev, H. Lin, S. Jia, and M. Z. Hasan, *Science* **349**, 613 (2015).
- [28] A. Y. Kitaev, *Phys. Usp.* **44**, 131 (2001).
- [29] X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
- [30] H.-Y. Hui, P. M. R. Brydon, J. D. Sau, S. Tewari, and S. D. Sarma, *Sci. Rep.* **5**, 8880 (2015).
- [31] P. San-Jose, J. L. Lado, R. Aguado, F. Guinea, and J. Fernández-Rossier, *Phys. Rev. X* **5**, 041042 (2015).
- [32] C. V. Kraus, M. Dalmonte, M. A. Baranov, A. M. Läuchli, and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 173004 (2013).
- [33] R. M. Lutchyn, J. D. Sau, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 077001 (2010).
- [34] C. C. Wu, J. Sun, F. J. Huang, Y. D. Li, and W. M. Liu, *Europhys. Lett.* **104**, 27004 (2013).
- [35] D. I. Pikulin, C.-K. Chiu, X. Zhu, and M. Franz, *Phys. Rev. B* **92**, 075438 (2015).
- [36] L. Jiang, T. Kitagawa, J. Alicea, A. R. Akhmerov, D. Pekker, G. Refael, J. I. Cirac, E. Demler, M. D. Lukin, and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 220402 (2011).
- [37] L.-J. Lang, X. Cai, and S. Chen, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 220401 (2012).
- [38] D.-L. Deng, S.-T. Wang, K. Sun, and L.-M. Duan, *Phys. Rev. B* **91**, 094513 (2015).
- [39] Y. Li-Jun, L. Li-Jun, L. Rong, and H. Hai-Ping, *Commun. Theor. Phys.* **63**, 445 (2015).
- [40] H.-Q. Wang, M. N. Chen, R. W. Bomantara, J. Gong, and D. Y. Xing, *Phys. Rev. B* **95**, 075136 (2017).
- [41] M. Thakurathi, A. A. Patel, D. Sen, and A. Dutta, *Phys. Rev. B* **88**, 155133 (2013).
- [42] F. L. Pedrocchi, S. Chesi, and D. Loss, *Phys. Rev. B* **84**, 165414 (2011).
- [43] O. Petrova, P. Mellado, and O. Tchernyshyov, *Phys. Rev. B* **90**, 134404 (2014).

- [44] C. Dutreix, M. Guigou, D. Chevallier, and C. Bena, *Eur. Phys. J. B* **87**, 296 (2014).
- [45] J. Klinovaja, P. Stano, and D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 176401 (2016).
- [46] P. Delplace, D. Ullmo, and G. Montambaux, *Phys. Rev. B* **84**, 195452 (2011).
- [47] G. Abal, R. Donangelo, A. Romanelli, A. C. Sicardi Schifino, and R. Siri, *Phys. Rev. E* **65**, 046236 (2002).
- [48] C. E. Creffield, G. Hur, and T. S. Monteiro, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 024103 (2006).
- [49] H. Wang, D. Y. H. Ho, W. Lawton, J. Wang, and J. Gong, *Phys. Rev. E* **88**, 052920 (2013).
- [50] D. Y. H. Ho and J. Gong, *Phys. Rev. B* **90**, 195419 (2014).
- [51] J. N. Bandyopadhyay and T. Guha Sarkar, *Phys. Rev. E* **91**, 032923 (2015).
- [52] R. W. Bomantara, G. N. Raghava, L. Zhou, and J. Gong, *Phys. Rev. E* **93**, 022209 (2016).
- [53] W. Shockley, *Phys. Rev.* **56**, 317 (1939).
- [54] S. Davison and M. Stešlicka, *Basic Theory of Surface States*, Monographs on the Physics and Chemistry of Materials (Oxford University Press, New York, 1992).
- [55] S. S. Pershoguba and V. M. Yakovenko, *Phys. Rev. B* **86**, 075304 (2012).
- [56] A. A. Burkov, M. D. Hook, and L. Balents, *Phys. Rev. B* **84**, 235126 (2011).
- [57] L. Torres, S. Roche, and J. Charlier, *Introduction to Graphene-Based Nanomaterials: From Electronic Structure to Quantum Transport* (Cambridge University Press, New York, 2014).
- [58] M. S. Rudner, N. H. Lindner, E. Berg, and M. Levin, *Phys. Rev. X* **3**, 031005 (2013).
- [59] P. Soltan-Panahi, D.-S. Luhmann, J. Struck, P. Windpassinger, and K. Sengstock, *Nat. Phys.* **8**, 71 (2012).
- [60] P. Soltan-Panahi, J. Struck, P. Hauke, A. Bick, W. Plenkers, G. Meineke, C. Becker, P. Windpassinger, M. Lewenstein, and K. Sengstock, *Nat. Phys.* **7**, 434 (2011).
- [61] G. Jotzu, M. Messer, R. Desbuquois, M. Lebrat, T. Uehlinger, D. Greif, and T. Esslinger, *Nature (London)* **515**, 237 (2014).
- [62] M. Messer, R. Desbuquois, T. Uehlinger, G. Jotzu, S. Huber, D. Greif, and T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 115303 (2015).
- [63] M. Weinberg, C. Staarmann, C. Ischlgexr, J. Simonet, and K. Sengstock, *2D Mater.* **3**, 024005 (2016).
- [64] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **93**, 035439 (2016).

Artículo E

Topological edge states on time-periodically
strained armchair graphene nanoribbons

Pedro Roman-Taboada, G. G. Naumis

El artículo ha sido publicado en
Physical Review B Vol. 96, pp. 155435, 2017.

The layout has been revised.

Topological edge states on time-periodically strained armchair graphene nanoribbons

Pedro Roman-Taboada* and Gerardo G. Naumis

*Departamento de Sistemas Complejos, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México,
Apartado Postal 20-364, 01000 México, Ciudad de México, México*

(Received 2 August 2017; published 13 October 2017)

We report the emergence of electronic edge states in time-periodically driven strained armchair terminated graphene nanoribbons. This is done by considering a short-pulse spatial-periodic strain field. Then, the tight-binding Hamiltonian of the system is mapped into a one-dimensional ladder. The time periodicity is considered within the Floquet formalism. Thus the quasienergy spectrum is found numerically by diagonalizing the evolution operator. For some particular cases, the quasienergy spectrum is found analytically. We found that the system is able to support gapless and gapped phases. Very different edge states emerge for both the gapless and the gapful phases. In the case of the gapped phase, edge states emerge at the gap centered at zero quasienergy, although the Chern number is zero due to the chiral symmetry of the system. For the gapless phase, besides edge states at zero quasienergy, cosinelike edge states which merge and coexist with the bulk band are observed. To confirm the topological nature of these edge states, we analytically obtained the effective Hamiltonian and its spectrum for a particular case, finding that the edge states are topologically weak. Finally, we found analytically the evolution of band edges and their crossings as a function of the driven period. Topological modes arise at such crossings.

DOI: [10.1103/PhysRevB.96.155435](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.155435)**I. INTRODUCTION**

Topological insulators are materials which can support topologically protected low-energy excitations at the edges [1]. Such low-energy excitations have attracted a lot of attention due to their potential to be used in the field of topological quantum computing [2,3] or in spintronics [4–6]. After the experimental observation of topological insulators [7,8], many systems exhibiting topologically nontrivial properties have been proposed [9–27]. Among them, one can mention the remarkable case of periodically driven systems, which have been proven to have very rich and newer interesting topological features when compared with the static topological case [11,28,29]. For instance, periodically driven systems can give rise to Majorana-like edge states [30], chiral and counterpropagating edge states [13], among many others [31–35]. The emergence of edge states is protected by a conservation law or symmetry of the bulk system; this is the so-called bulk-edge correspondence [36]. The role played by the symmetries is fundamental to correctly describe the topological properties of these kinds of systems, since they shed light about the topological invariant that can be used to describe them [37,38]. Although great progress has been made in the topological classification of periodically driven gapful systems [39,40], the topological classification of gapless systems is yet incomplete. For instance, the topological properties of Dirac semimetals cannot be described by the topological invariants used for gapful systems [41]. This is precisely the case of the topological modes in graphene. This material is a truly two-dimensional crystal with extraordinary mechanical properties (that have given rise to very interesting phenomena in mechanically deformed graphene [42–48]), which is known to have a nontrivial topological behavior not only in the static case [46,49–52] but also in the periodically driven case [26,53–55]. Among these interesting phenomena

for the time-dependent case, we can cite chiral edge states [13], flat bands [26], Majorana-like edge modes [56], and so on.

Motivated by the previous discussion, we decided to study the emergence of edge states in periodically driven uniaxial strained armchair graphene nanoribbons (AGNs) using a tight-binding approach within the Floquet theory. In particular and thinking on the possibility of achieving this system experimentally, we consider a spatial-periodic strain field. It is important to remark that in a previous work we have considered the case of a periodically driven strained zigzag graphene nanoribbon [26] (ZGN). The case studied here is fundamentally different from the zigzag one. The first and maybe most important difference is that the AGN case can support gapless and gapful phases while the ZGN case can only support a gapless phase. This is a consequence of the static properties of strained graphene nanoribbons (see, for example, [46,57–59]). Second, the nature of the edge states of periodically driven strained AGNs is completely different from the one observed in the ZGN case (see [26]). For instance, as will be seen later on, for periodically driven AGNs in the gapless phase, cosinelike edge states emerge; these states merge and coexist with the bulk bands. On the other hand, for the gapful phase, besides the edge states that appear in the gap centered at zero quasienergy, other edge states emerge in other gaps. This is an interesting fact since it has been proven for periodically driven chiral systems that full gaps around zero and $\pm\pi$ quasienergies are topologically trivial from the Chern number point of view [60]. The implications of this fact are discussed below.

In addition, it is important to mention that the experimental realization of our model can be hard since the required deformation field time scales are very fast (we need a driving period around femtoseconds to observe the effects here discussed; see [26]). However, there are some proposed experiments quite similar to our model. For instance, one can put graphene upon a substrate, say hexagonal boron

*pedro.roman.taboada@gmail.com

nitride (h-BN); then, since the lattice constants of graphene and h-BN are different, graphene would be deformed. The periodic modulation can be achieved by periodically applying pressure to the complete system (graphene and substrate), as is suggested in [22,26]. Even if this method fails, our model can be implemented in optical lattices for which the hopping parameters can be tailored at will [61].

To finish, the paper is organized as follows. In Sec. II we describe the theoretical model and the notation to be used, while in Sec. III we analyze the quasienergy spectrum and the edge states for both the gapped and the gapless phases of our model. The topological properties of the edge states for both the gapless and the full gapped phase are discussed in Sec. IV via the symmetries of the time evolution operator. In Sec. V we study the topological nature of the edge states that emerge in the gapless phase via an effective Hamiltonian approach for a one-dimensional slide of the whole system. Some conclusions are proposed in Sec. VI. Appendices A and B include some calculations concerning the main text.

II. PERIODICALLY DRIVEN STRAINED GRAPHENE

Consider a pristine armchair graphene nanoribbon as the one shown in Fig. 1(a). Suppose that now we apply a spatially

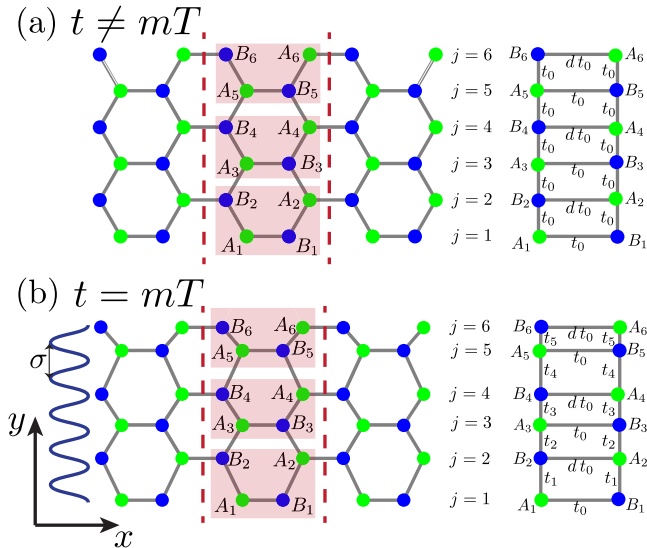


FIG. 1. Schematic representation of the periodically delta driving layout for an armchair graphene nanoribbon. (a) For $t \neq T$, the strain field is turned off. (b) The strain field is turned on for $t = mT$. Here T is the period of the delta driving. For uniaxial strain along the y direction (in particular we consider a sinusoidal strain with wavelength σ), the strained armchair graphene nanoribbon can be mapped onto a one-dimensional effective system, which is represented by linear ladders on the left of the figure. Solid dots represent the position of carbon atoms. The shaded areas correspond to some unitary cells of pristine graphene, while the red dotted lines correspond to the limits of the unit cell in the x direction. j labels the rows in graphene, while A and B are used to denote each of the bipartite lattices [59]. Carbons on each sublattice are indicated by green and blue.

periodic strain field along the y direction, given by

$$u(y_j) = \lambda \cos(2\pi\sigma y_j + \phi), \quad (1)$$

where λ is the amplitude, σ is the wavelength, and ϕ is the phase of the strain field. y_j are the positions of the carbon atoms along the y direction inside the unit cell (see Fig. 1, wherein the unit cell of the system is indicated by dotted red lines). The main advantage of uniaxial strain is the symmetry along the x axis that allows a good quantum number to be associated with the quasimomentum along the x direction, that we denote by k_x . As a result, it is possible to decouple the two-dimensional system into an effective one-dimensional system [45,46,62]. In the tight-binding limit, the electronic properties of an armchair graphene nanoribbon under a uniaxial strain field, as the one in Eq. (1), are described by the following one-dimensional effective Hamiltonian [46]:

$$H(k_x) = \sum_{j=1}^{N/2-1} \gamma_0 [d(k_x) a_{2j}^\dagger b_{2j} + a_{2j-1}^\dagger b_{2j-1}] + \sum_{j=1}^{N/2-1} \gamma_j a_j^\dagger b_{j+1} + \text{H.c.}, \quad (2)$$

where $d(k_x) = \exp(3i k_x a_c)$, k_x is the crystal momentum in the x direction, and a_c is the interatomic distance between carbon atoms in unstrained graphene. In what follows, we will set $a_c = 1$ and thus all quasimomenta k_x are measured in units of a_c^{-1} . N is the number of atoms per unit cell and a_j (b_j) annihilates an electron at the site j in the graphene's bipartite sublattice A (B) (see Fig. 1). The hopping parameters are given by

$$\frac{\gamma_j}{\gamma_0} = \exp[\beta(\sqrt{1 - \lambda\sqrt{3}f(j,\sigma,\phi) + \lambda^2 f^2(j,\sigma,\phi)} - 1)], \quad (3)$$

where $\beta \approx 3.37$ is the rate of decay [63,64] (the Grüneisen parameter). The parameter $\gamma_0 = 2.7 \text{ eV}$ is the interatomic hopping parameter for pristine graphene that we will set as $\gamma_0 = 1$ in what follows, that is, all energies will be measured in units of γ_0 . Finally the function $f(j,\sigma,\phi)$ is defined as

$$f(j,\sigma,\phi) = 2 \sin(\sqrt{3}\pi\sigma/2) \sin[\sqrt{3}\pi\sigma(j+1/2) + \phi]. \quad (4)$$

The main features of this Hamiltonian have been described in a previous work, in the small strain's amplitude limit [46]. Let us make some remarks about the difference between considering zigzag or armchair graphene nanoribbons. As has been proven before, it is much easier to open a gap applying a strain field along the zigzag direction on an armchair graphene nanoribbon [59]. Therefore, one expects that gaps emerge for certain parameters' values. In addition, one also expects edge states to be very different from the zigzag case [65]. Indeed this will be the case, as will be proven in what follows.

Once the Hamiltonian of a uniaxial strained AGN has been presented, we now introduce the time dependence to the model. In particular, we consider the case of a short-time strain impulse that can be approximated as a delta kicking. A graphic description of the driving layout is shown in Fig. 1. Therein, we see that the deformation field is turned on at times $t = mT$ where T is the driving period and m is an integer number. The strain is turned off whenever $t \neq mT$. That is,

we consider a time-dependent Hamiltonian of the following form:

$$H(k_x, t) = H_0(k_x) + \sum_m [H_1(k_x) - H_0(k_x)] \delta(t/T - m), \quad (5)$$

with the Hamiltonians H_0 and H_1 given by

$$\begin{aligned} H_0(k_x) = & \sum_{j=1}^{N/2-1} \gamma_0 [d(k_x) a_{2j}^\dagger b_{2j} + a_{2j-1}^\dagger b_{2j-1}] \\ & + \sum_{j=1}^{N/2-1} \gamma_0 a_j^\dagger b_{j+1} + \text{H.c.} \end{aligned} \quad (6)$$

and

$$\begin{aligned} H_1(k_x) = & \sum_{j=1}^{N/2-1} \gamma_0 [d(k_x) a_{2j}^\dagger b_{2j} + a_{2j-1}^\dagger b_{2j-1}] \\ & + \sum_{j=1}^{N/2-1} \gamma_j a_j^\dagger b_{j+1} + \text{H.c.} \end{aligned} \quad (7)$$

Even though the experimental realization of the proposed driving layout is experimentally challenging, there are some proposed experiments for similar situations [22,66], as was discussed in the Introduction.

To study the quasienergy spectrum we construct the one-period time evolution operator of the system, defined as [67]

$$U(k_x, T) |\psi_{k_x}(t)\rangle = |\psi_{k_x}(t + T)\rangle, \quad (8)$$

where $|\psi_{k_x}(t)\rangle$ is the time-dependent wave function of the system for a given quasimomentum k_x along the x axis. For the considered delta-kicking driving layout, $U(k_x, T)$ can be written in a very simple manner, namely,

$$\begin{aligned} U(k_x, \tau) = & \mathcal{T} \exp \left[-i \int_0^\tau H(k_x, t) dt / \hbar \right] \\ = & \exp \{ -i \tau [H_1(k_x) - H_0(k_x)] \} \exp [-i \tau H_0(k_x)], \end{aligned} \quad (9)$$

where \mathcal{T} denotes the time ordering operator and $\tau = T/\hbar$.

Even though the Hamiltonians $H_1(k_x)$ and $H_0(k_x)$ do not commute, we can study the eigenvalue spectrum of $U(k_x, \tau)$ via an effective Hamiltonian defined as

$$U(k_x, \tau) = \exp [-i \tau H_{\text{eff}}(k_x, \tau)]. \quad (10)$$

The previous time evolution operator has eigenvalues $\exp(-i\tau\omega)$, where $\tau\omega$ are called the quasienergies of the system. They are defined up to integer multiples of 2π . After introducing the time dependence to the model, there are four free parameters: three owing to the strain field (λ , σ , and ϕ) and one owing to the driving (τ).

One can study the system for a wide range of parameters. Maybe the most important one is σ since it controls the wavelength of the strain field. If this wavelength is incommensurate with respect to the graphene cell, the system is quasiperiodic, resulting in a complex spectrum for the static undriven case [45,59]. However, since topological states are observed only when translational invariance holds [68], here we study only commensurate cases. In particular, we chose two different

values for σ , namely, (1) $\sigma = 1/\sqrt{3}$ and (2) $\sigma = 0.5/\sqrt{3}$, setting $\phi = \pi\sigma$ for each case. We have chosen such σ values since $\sigma = 1/\sqrt{3}$ gives the smallest spatial period along the y axis and the system is on a gapless phase around zero and $\pm\pi$ quasienergy in the bulk spectrum, while for $\sigma = 0.5/\sqrt{3}$ we obtain the next size of the spatial period and the system becomes gapped around zero quasienergy in the bulk spectrum.

For $\sigma = 1/\sqrt{3}$ the supercell contains two rows of graphene in the y direction or, in other words, four inequivalent carbon atoms in the supercell, since the hopping parameters just take two different values, which are given by substituting the following expression,

$$f(j, 1/\sqrt{3}, \phi) = 2\lambda(-1)^j \cos(\phi), \quad (11)$$

in Eq. (3). On the other hand, for $\sigma = 1/2\sqrt{3}$ the hopping parameters takes four different values, meaning that now the supercell has eight inequivalent atoms. Once again, the hopping parameters are given by substituting the following expression,

$$f\left(j, \frac{1}{2\sqrt{3}}, \phi\right) = 2\lambda \sin\left[\frac{\pi}{2}(j+1/2)\right] \sin\left[\frac{\pi}{4} + (-1)^j \phi\right], \quad (12)$$

in Eq. (3).

III. QUASIENERGY SPECTRUM

In this section we study the quasienergy spectrum and the emergence of topological edge states. We start by building the matrix representation of $U(k_x, \tau)$ as described in Eq. (9). Then, their eigenvalues as a function of k_x are obtained by numerical calculations for a finite system. For all numerical cases presented here we will consider a system with $N = 324$. It is worthwhile to note that for $\sigma = 1/\sqrt{3}$ or $1/2\sqrt{3}$ the system becomes periodic in the y direction. Therefore, by applying cyclic boundary conditions along the x and y directions, the quasienergy spectrum can be also obtained by Fourier transforming the Hamiltonians $H_0(k_x)$ and $H_1(k_x)$ and then substituting them into Eq. (9). No edge states appear in the quasienergy dispersion relation obtained by using this method, but it allows us to compare numerical with analytical results. To observe edge states, here we needed to perform calculations in real space for the y direction.

Let us start by studying the quasienergy spectrum for $\sigma = 1/\sqrt{3}$, in other words, the gapless quasienergy spectrum. In Fig. 2 we show the quasienergy band structure for $\lambda = 0.2$, $\tau = \pi$, $\phi = \pi\sigma$, and $\sigma = 1/\sqrt{3}$. In panel (a) we have used cyclic boundary conditions, whereas for panel (b) the boundary conditions were changed to fixed. Observe that the main difference between panels (a) and (b) is that in panel (b) edge states emerge. The colors in the figure represent the logarithm of the normalized inverse participation ratio (IPR), which is defined as in [45], namely,

$$\alpha(E) = \frac{\ln \sum_{j=1}^N |\psi(j)|^4}{\ln N}, \quad (13)$$

where $\psi(j)$ is the eigenfunction at site j for an energy E . The IPR is a measure of the wave-function localization. The closer to zero the IPR (red color in figures) the more localized the

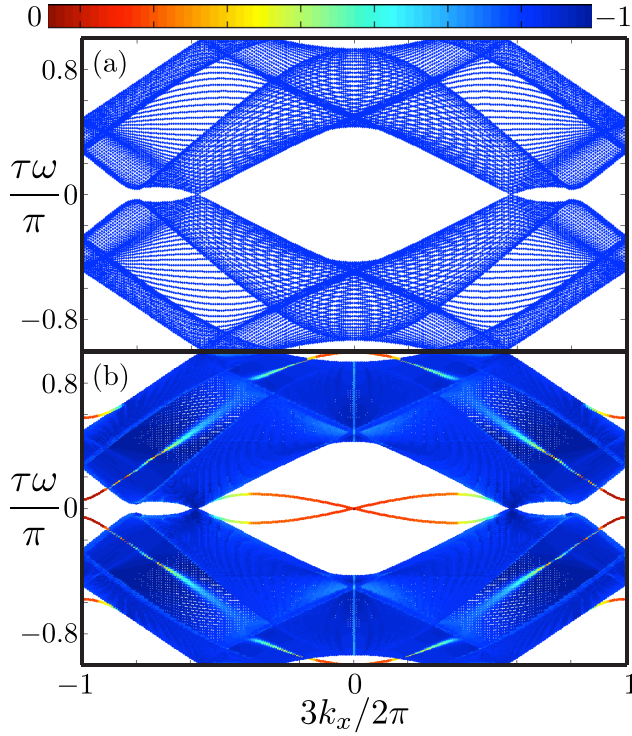


FIG. 2. Gapless quasienergy band structure obtained from the numerical diagonalization of the matrix representation given by Eq. (9). The parameters used are $\sigma = 1/\sqrt{3}$, $\lambda = 0.2$, $\tau = \pi$, $\phi = \pi\sigma$, and $N = 324$, for (a) cyclic boundary conditions and (b) fixed boundary conditions. In panel (a), note that no edge states appear since cyclic boundary conditions were used. In panel (b), two kinds of edge states emerge. One appears around zero quasienergy. The others are cosinelike edge states that merge and coexist with the bulk bands. The colors represent the inverse participation ratio. For red color the states are highly localized, whereas for blue color they are totally delocalized.

wave function is. Delocalized or extended wave functions are labeled by blue color in the figures, and correspond to $\alpha(E)$ tending to -1 .

It is interesting to note that even though the system is on a gapless phase edge states appear. Moreover, two kinds of edge states are observed in Fig. 2. Edge states of one kind are around zero quasienergy and are degenerated at $k_x = 0$, but they begin to decouple and delocalize as one moves away from that point. Observe that they follow a cosinelike dispersion. Edge states of the other kind also have a cosinelike dispersion and are degenerated at $k_x = 0$ at $\pm\pi$ quasienergy. As k_x moves away from that point, these edge states decouple and, eventually, they merge with the bulk bands without becoming totally delocalized states. We have numerically checked that they are localized near opposite edges of the AGN. Additionally, we stress that the quasienergy spectrum strongly depends upon the phase ϕ of the strain field. To see this point, in Fig. 3 we present the quasienergy band structure for $\phi = 0$ (a) and $\phi = \pi\sigma/2$ (b). In panel (a), it can be seen that edge states are quite similar to the ones shown in Fig. 2(b). On the other hand, observe that the edge states in Fig. 3(b) do not touch each other either at zero or at $\pm\pi$ quasienergies when $k_x = 0$;

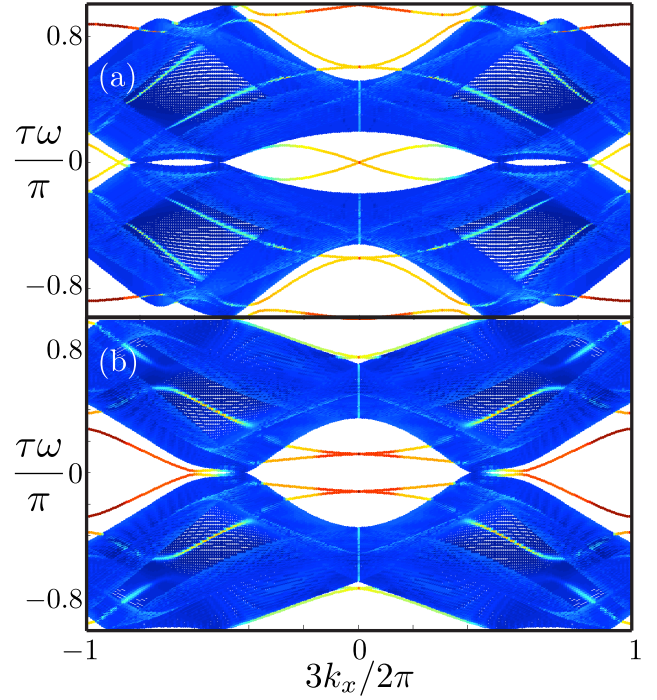


FIG. 3. Gapless quasienergy band structure obtained from the numerical diagonalization of the matrix representation of Eq. (9). The parameters used are $\sigma = 1/\sqrt{3}$, $\lambda = 0.2$, $\tau = \pi$, $N = 324$, and using fixed boundary conditions for (a) $\phi = 0$ and (b) $\phi = \pi\sigma/2$. Note that for panels (a) and (b) the edge states deeply penetrate into the bulk bands. Also, for panel (b), edge states around zero quasienergy are decoupled. The same color code as in Fig. 2 was used to display localization of each mode.

instead a gap between them has been opened. Besides that, they decouple into four bands around zero quasienergy. Note how all the edge states in Fig. 3(a) deeply penetrate into the bulk bands.

The strong dependence of the quasienergy band structure on ϕ can be explained as follows. Basically, the phase ϕ determines how the strain pattern matches with the edges of the AGN, a fact that has been proven to be crucial in the topological properties of similar systems [18,69]. Although all the observed edge states are interesting enough, in the next section, we will focus only on the topological characterization of the ones that emerge for $\phi = \pi\sigma$.

Before finishing, let us analyze the quasienergy spectrum for the full gapped phase of our system. Since topological edge states are very robust to small perturbations, we expect edge states not to be destroyed by a full gap in the bulk spectrum. This assertion is confirmed in Fig. 4, where we have plotted the quasienergy band structure for a gapped phase of the system, that is, we used the same conditions as in Fig. 4 but using $\sigma = 1/2\sqrt{3}$ for fixed boundary conditions. As can be seen, four edge states emerge around zero quasienergy closing the bulk gap. Note that they linearly merge in a single point at $k_x = 0$, which is a time-reversal invariant point, similarly to the edge states observed in Fig. 2. Additionally, other edge states emerge always so that a partial gap appears on the quasienergy spectrum [see Fig. 4(b)]. As will be shown in the

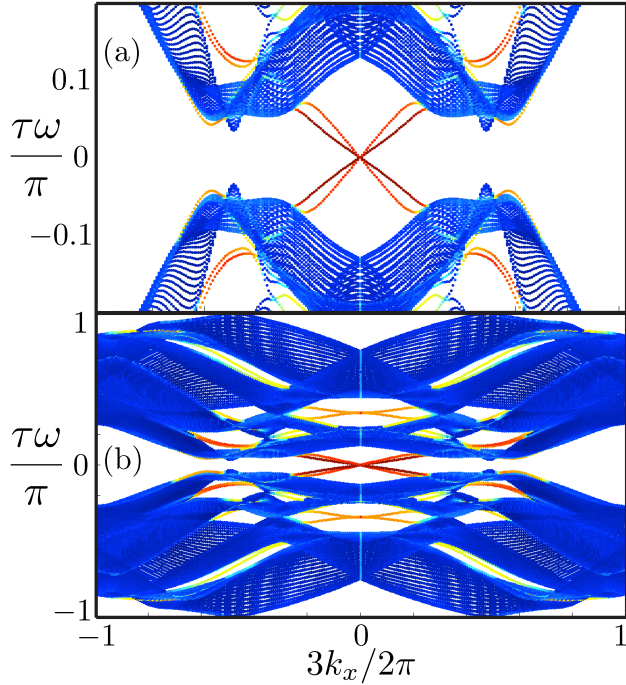


FIG. 4. Gapful quasienergy band structure obtained from the numerical diagonalization of the matrix representation of Eq. (9) for $\sigma = 1/2\sqrt{3}$, $\lambda = 0.2$, $\tau = \pi$, $\phi = \pi\sigma$, and $N = 324$ using fixed boundary conditions. (a) An amplification around zero quasienergy to highlight the zero quasienergy edge modes. Observe that edge states also emerge at other gaps. The same color code as in Fig. 2 was used to display localization of each mode.

next section, our model possesses chiral symmetry and thus edge states that appear in the gap around zero quasienergy are topologically trivial from the point of view of the Chern number [60], although they can have a weak topological nature [70–72]. However, edge states at other gaps (that is, full gaps not centered around zero or $\pm\pi$ quasienergy) can be topologically nontrivial [60].

IV. TOPOLOGICAL PROPERTIES OF EDGE STATES

Before entering into the study of the topological properties of the system, let us write the Fourier-transformed version of the Hamiltonians $H_1(k_x)$ and $H_0(k_x)$ when periodic boundary conditions are used in the y direction. For that case, it is possible to fully write the Hamiltonians $H_1(k_x)$ and $H_0(k_x)$ in reciprocal space by taking into account the new periodicity in the y direction. This leads to a new quantum number k_y , from which it follows that $H_1(k_x)$ and $H_0(k_x)$ can be simplified using a suitable Fourier transform. In fact, it can be proven that such Hamiltonians are reduced to a $4Q \times 4Q$ matrix dependent on $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, where $4Q$ is the number of inequivalent rows in the y direction. Notice that Q is related to σ as $\sigma = P/(\sqrt{3}Q)$, since in Eq. (1) the positions y_j are evaluated at graphene's sites along a zigzag path, where atoms are separated by distances $\sqrt{3}a_c/2$. For the case $\sigma = 1/\sqrt{3}$, the matrices have their lowest size since $Q = 1$, therefore Hamiltonians $H_1(\mathbf{k})$ and $H_0(\mathbf{k})$ are 4×4 matrices. This is the most simple case and can be studied analytically. Such a

case deserves special attention and will be studied in the next section.

Yet one can make further progress by writing the Hamiltonian for a general Q in the chiral basis, i.e., in a basis such that all sites in the A sublattice appear as the first entries in the vector, then followed by its corresponding counterparts in the B sublattice [59]. Then one obtains

$$\mathbb{H}_l(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} 0 & \tilde{\mathbb{H}}_l(\mathbf{k}) \\ \tilde{\mathbb{H}}_l^\dagger(\mathbf{k}) & 0 \end{bmatrix}, \quad (14)$$

where $l = 0, 1$ and the tilde indicates $2Q \times 2Q$ matrices. The explicit form of $\tilde{\mathbb{H}}_l(\mathbf{k})$ is given in Appendix A for the particular case of $\sigma = 1/\sqrt{3}$. The perturbation $\delta\mathbb{H}(k_y) = \mathbb{H}_1(\mathbf{k}) - \mathbb{H}_0(\mathbf{k})$ is simply written as

$$\delta\mathbb{H}(k_y) = \begin{bmatrix} 0 & \delta\tilde{\mathbb{H}}(k_y) \\ \delta\tilde{\mathbb{H}}^\dagger(k_y) & 0 \end{bmatrix}, \quad (15)$$

where $\delta\tilde{\mathbb{H}}(k_y) = \tilde{\mathbb{H}}_1(\mathbf{k}) - \tilde{\mathbb{H}}_0(\mathbf{k})$. The explicit form of these matrices for $\sigma = 1/\sqrt{3}$ is given in Appendix A. Notice that k_x cancels out as the perturbed and unperturbed Hamiltonians have the same symmetry in the x axis.

For studying the topological properties of our model we start by looking at the symmetries of the Hamiltonians $\mathbb{H}_1(\mathbf{k})$ and $\mathbb{H}_0(\mathbf{k})$. Note that such Hamiltonians fulfill the following condition:

$$\Gamma\mathbb{H}_l(\mathbf{k})\Gamma = -\mathbb{H}_l(\mathbf{k}), \quad (16)$$

where $l = 0, 1$ and Γ is the so-called chiral operator. Γ is a unitary operator which can be represented, in the chiral basis, as

$$\Gamma = \begin{bmatrix} \mathbb{I}_{2Q \times 2Q} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I}_{2Q \times 2Q} \end{bmatrix} \quad (17)$$

with the property that $\Gamma^2 = \mathbb{I}_{4Q \times 4Q}$. As a consequence of Eq. (16), the Fourier-transformed version of the time-dependent Hamiltonian, Eq. (5), possesses the following property:

$$\Gamma\mathbb{H}(\mathbf{k}, t)\Gamma = -\mathbb{H}(\mathbf{k}, -t). \quad (18)$$

From Eq. (18) it follows that the Hamiltonian Eq. (5) is chiral, therefore the time evolution operator Eq. (9) must satisfy the following condition:

$$\Gamma\mathbb{U}(\tau)\Gamma = \mathbb{U}^{-1}(\tau) = \mathbb{U}^\dagger(\tau) = \mathbb{U}(-\tau), \quad (19)$$

where the time evolution operator is now given by

$$\mathbb{U}(\tau) = e^{-i\tau\delta\mathbb{H}(\mathbf{k})}e^{-i\tau\mathbb{H}_0(\mathbf{k})}. \quad (20)$$

Observe that, by using Eq. (19), $\mathbb{U}(-\tau)$ can be written as

$$\mathbb{U}(-\tau) = e^{i\tau\mathbb{H}_0(\mathbf{k})}e^{i\tau\delta\mathbb{H}(\mathbf{k})}, \quad (21)$$

which is the same result that one obtains directly from the time ordering operator that appears in Eq. (9).

Due to the condition Eq. (19), the quasienergy spectrum is symmetric with respect to reflections along the k_x axis, as confirmed in Figs. 2–4. Moreover, the chiral symmetry

for fully gapped systems in two dimensions imposes the vanishing of the topological invariant at full gaps centered around zero and $\pm\pi$ quasienergy [60], although other gaps can be topologically nontrivial [60]. Even though this fact sheds light about the topological nature of the edge states observed in the fully gapped phase, it does not give any information of the topology of the edge states that emerge in the gapless phase. In fact, the topological nature of these edge states is not clear [60]. Therefore, the topological characterization of such states will be done in the next section, in which we study the topological properties of a one-dimensional slice of the whole two-dimensional system; in particular, there we will consider the case $k_x = 0$.

To finish, let us discuss the the topological properties of the edge states observed in the gapful phase of our system. As was mentioned before, for the case $\sigma = 1/2\sqrt{3}$ the topological invariant for the central gap is zero but edge states emerge in the gap centered at zero quasienergy (see Fig. 4). Despite this fact, edge states that close the gap at zero quasienergy emerge. This implies that a different topological invariant is needed to characterize the system or that the edge states are topologically weak [70]. It is worth mentioning that such edge states exhibit a linear dispersion for low quasienergies and that the edge states cross each other at a time-reversal point, namely, $k_x = 0$. As is well known, such a crossing is required by time-reversal symmetry and is one of the signatures of a topological insulator [73]; in other words, such states seem to be topologically nontrivial. Nevertheless, to completely determine the topological nature of these states, it is necessary to compute the topological invariant of the system. Since the topological invariant is not yet well defined for time-periodically driven systems and since the calculation of the invariant is beyond the scope of the present paper, we do not compute it. However, we expect that our paper will motivate further studies about these edge states.

V. ANALYTICAL STUDY OF THE TOPOLOGY FOR $\sigma = 1/\sqrt{3}$ AT $k_x = 0$

We begin by studying the emergence of edge states for the gapless case, obtained for $\sigma = 1/\sqrt{3}$. For doing that, as seen in Fig. 5, note that edge states will emerge for the first time when the lower and upper quasienergy band edges cross each other [74] as τ is increased from zero (keeping the other parameters fixed). Band edges correspond to extremal values of the quasienergy spectrum for the time evolution operator given by Eq. (20). It is easy to see that such maximum and minimum values are reached when the Hamiltonians \mathbb{H}_0 and $\delta\mathbb{H}$ commute. Let us denote by k_x^* and k_y^* the points at which this happens. From Eq. (A5), we can readily obtain that $k_x^* = 3n\pi/2$ and $k_y^* = n\pi/\sqrt{3}$, where n is an integer number. Since we are interested in a one-dimensional slice of our system, we first consider $k_x = 0$ and then study the quasienergy spectrum as a function of k_y . As is proven in Appendix B, for $k_x = 0$, the time evolution operator becomes block diagonal:

$$\mathbb{U}'(\tau) = \begin{bmatrix} e^{i\tau\delta\tilde{h}(k_y)} e^{i\tau\tilde{h}_0(k_y)} & 0 \\ 0 & e^{-i\tau\delta\tilde{h}(k_y)} e^{-i\tau\tilde{h}_0(k_y)} \end{bmatrix}, \quad (22)$$

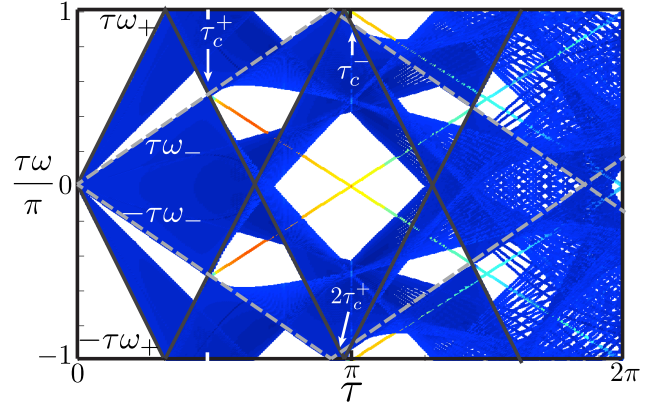


FIG. 5. Quasienergy band spectrum for $k_x = 0$ as a function of τ obtained by numerical diagonalization of Eq. (9) using $N = 324$, $\sigma = 1/\sqrt{3}$, $\lambda = 0.2$, $\phi = \pi\sigma$, and fixed boundary conditions compared with the band edges obtained from the analytical calculation given by Eqs. (30) and (32). The quasienergy band edge $\tau\omega^+$ ($\tau\omega^-$) is denoted by solid black (dotted gray) lines. Note that such band edges cross each other for the first time at $\tau = \tau_c^\pm$ at quasienergies different from zero or $\pm\pi$. It is interesting that for $\tau = \tau_c^+$ edge states emerge, which is not the case for τ_c^- . This is related with the nature of the crossings. Also, observe that the edge states are not flat bands but they depend linearly on τ . See Sec. V.

where $\mathbb{U}'(\tau)$ is the time evolution operator Eq. (20) written in the basis where \mathbb{H}_0 is diagonal (see the Appendices for details). $\delta\tilde{h}(k_y)$ and $\tilde{h}_0(k_y)$ can be written as follows:

$$\begin{aligned} \delta\tilde{h}(k_y) &= \delta h(k_y) \delta\hat{\mathbf{h}} \cdot \sigma, \\ \tilde{h}_0(k_y) &= \mathbb{I}_{2 \times 2} + 2 \cos(\sqrt{3}k_y/2) \sigma_z, \end{aligned} \quad (23)$$

where $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, σ_i ($i = x, y, z$) is the 2×2 Pauli matrix, $\delta\hat{\mathbf{h}} = \delta\mathbf{h}/\delta h$, and the components of $\delta\mathbf{h}$ are given by

$$\begin{aligned} \delta h^{(y)} &= (\gamma_1 - \gamma_2) \sin(\sqrt{3}k_y/2), \\ \delta h^{(z)} &= (\gamma_1 + \gamma_2 - 2) \cos(\sqrt{3}k_y/2), \end{aligned} \quad (24)$$

and we define the norm $\delta h(k_y)$ as

$$\delta h(k_y) = \sqrt{[\delta h^{(y)}]^2 + [\delta h^{(z)}]^2}. \quad (25)$$

Now, it is possible to analytically obtain the quasienergies of $\mathbb{U}'(\tau)$ by studying only one of the diagonal blocks in Eq. (22). We will do that via an effective Hamiltonian defined as

$$e^{i\tau\tilde{h}_{\text{eff}}(k_y)} = e^{i\tau\delta\tilde{h}(k_y)} e^{i\tau\tilde{h}_0(k_y)}. \quad (26)$$

For calculating \tilde{h}_{eff} we use the addition rule of SU(2). After some algebraic operations, we have

$$\tilde{h}_{\text{eff}}(k_y) = \mathbb{I}_{2 \times 2} + \Omega(k_y) \hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}} \cdot \sigma, \quad (27)$$

where $\hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}$ is a unit vector defined in Appendix B, and $\tau\Omega(k_y)$ satisfies

$$\begin{aligned} \cos[\tau\Omega(k_y)] &= \cos(\tau\delta h) \cos[2\tau \cos(\sqrt{3}k_y/2)] \\ &\quad - \hat{e}_z \cdot \delta\hat{\mathbf{h}} \sin(\tau\delta h) \sin[2\tau \cos(\sqrt{3}k_y/2)]. \end{aligned} \quad (28)$$

The quasienergies are given by the eigenvalues of the time evolution operator, denoted by $\pm\tau\omega(k_y)$, from which

$$\tau\omega(k_y) = \tau[\pm 1 + \Omega(k_y)]. \quad (29)$$

The topological information of the system for $\sigma = 1/\sqrt{3}$ and $k_x = 0$ is now contained in the effective Hamiltonian (27). It is illustrative to obtain the conditions for having edge states before studying the topological properties of the Hamiltonian (27). Since edge states will emerge when the lower and upper band edges cross each other for the first time, we begin by obtaining such band edges. As was mentioned before, the extreme values of the quasienergy spectrum are found at $k_x = k_x^* = 0$ and $k_y = k_y^* = 0$. After substituting such values in Eq. (28) we have

$$\tau\omega_{\pm} = \tau(\pm 1 + \gamma_1 + \gamma_2). \quad (30)$$

Now, the condition for having quasienergy band edge crossings at the critical values $\tau = \tau_c$ is given by

$$\tau_c(\omega_+ \pm \omega_-) = 2\pi. \quad (31)$$

By using Eq. (30) we obtain

$$\tau_c^+ = \frac{\pi}{\gamma_1 + \gamma_2}, \quad \tau_c^- = \pi. \quad (32)$$

All other band crossings are given by $m\tau_c^{\pm}$, where m is an integer number. To shed light on the previous analysis, it is meaningful to compare it with numerical results. In Fig. 5, we plot the quasienergy spectrum for $k_x = 0$ as a function of τ obtained by numerical diagonalization of Eq. (9) using $N = 324$, $\sigma = 1/\sqrt{3}$, $\lambda = 0.2$, $\phi = \pi\sigma$, and fixed boundary conditions. Therein, the band edges $\pm\tau\omega^{\pm}$ calculated from Eq. (30) are denoted by solid black (dotted gray) lines. The critical values of τ obtained from Eq. (32) are displayed as well. The agreement between the numerical and analytical calculations is excellent.

Notice in Fig. 5 how the edges $\tau\omega^{\pm}$ start at zero for $\tau = 0$. As τ is increased, $\tau\omega^+$ and $\tau\omega^-$ grow linearly but with different slopes. Since $\omega^+ \geq \omega^-$, ω^+ reaches first the limit of the Floquet zone. Then, as τ is further increased, ω^+ and ω^- cross each other at τ_c^+ . By further increasing τ a new band-edge crossing emerges at τ_c^- . Interestingly, the only crossings that produce edge states are the ones where $\tau = m\tau_c^+$. For the other crossings (at $m\tau_c^-$), no gap is opened, hence no edge states emerge. It is important to say that edge states emerge just for $\tau = m\tau_+$ because at these points there is a band inversion, whereas for $\tau = m\tau_-$ the band edges cross each other but they are not inverted. Due to the general mechanism, behind topological edge states' emergence is band inversion [73], thus edge states do not appear for $\tau = m\tau_-$.

Observe that for τ_c^+ the band-edge crossings do not occur at zero or $\pm\pi$ quasienergy; instead, they cross each other at

$$\tau_c^+\omega_{\pm} = \pi \pm \frac{\pi}{\gamma_1 + \gamma_2}. \quad (33)$$

Unlike the case of driven uniaxial strained zigzag graphene nanoribbons [26], the quasienergy at which these edge states emerge is different from zero or $\pm\pi$. Moreover, the edge states for the case considered here are not flat bands but unidirectional edge states, meaning that the quasienergy of such states grows linearly with τ (see Fig. 5). Note that as τ is increased edge

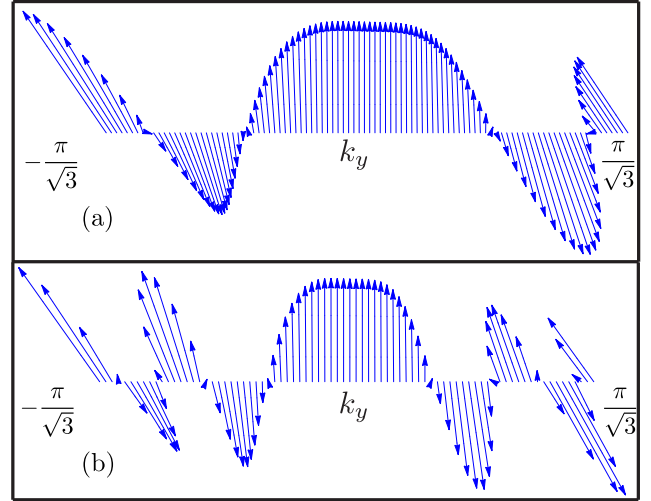


FIG. 6. The winding of the vector $\hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(k_y)$ for $k_x = 0$, $\lambda = 0.2$, $\sigma = 1/\sqrt{3}$, and $\phi = \pi\sigma$ using $\tau = \pi$ (a) and $\tau = 2\pi$ (b). The winding number for panel (a) is 2, whereas for panel (b) it is 4. Observe that by increasing the driving period τ the winding number is also increased.

states start to delocalize. When τ reaches 2π they are almost completely extended, as seen in Fig. 5 by looking at the colors that represent the normalized inverse participation ratio.

To finish this section, we will show that these edge states for τ and λ fixed are topologically nontrivial. This is done by studying the effective Hamiltonian Eq. (27). For having topologically nontrivial properties the winding number of the unitary vector $\hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(k_y)$ around the origin must be nonvanishing. This is confirmed graphically in Fig. 6, wherein we show the winding of $\hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}(k_y)$ for $k_x = 0$, $\lambda = 0.2$, $\phi = \pi\sigma$, and $\sigma = 1/\sqrt{3}$ for (a) $\tau = \pi$ and (b) $\tau = 2\pi$. As can be seen, the winding number for this particular case is 2 for panel (a) and 4 for panel (b). Hence, the system is topologically nontrivial for a one-dimensional slide at $k_x = 0$. This means that the edge states observed in Fig. 2(b) have a topologically weak nature.

VI. CONCLUSIONS

We observed the emergence of edge states in periodically driven uniaxial strained AGNs. This was done by finding numerically, and for some cases analytically, the quasienergy spectrum. The system has gapped phases (as, for example, with a spatial frequency $\sigma = 1/2\sqrt{3}$), and gapless phases (for example, $\sigma = 1/\sqrt{3}$). To understand the nature of the quasienergy spectrum and edge states, we showed that the system has a chiral symmetry implying a symmetric spectrum around zero quasienergy. For the gapped phase, highly localized edge states were found around zero quasienergy, which, due to the chirality of the system, are topologically trivial from the Chern number point of view, as has been shown recently in a paper by Fruchart [60]. This means that either a different topological invariant is needed to topologically characterize the system or edge states are weakly topological. Additionally, these states exhibit a linear dispersion around zero quasienergy and cross each other at a time-reversal invariant point ($k_x = 0$); such a crossing is imposed by the time-reversal symmetry

and is one of the signatures of a topological insulator [73]. Furthermore, this phase also exhibits edge states at secular gaps for quasienergies different from zero or $\pm\pi$ that could be topologically nontrivial, although a more detailed analysis is required.

On the other hand, for the gapless phase of the system, we found the necessary conditions for the emergence of edge states. Additionally, by studying a one-dimensional slice of the case system at $k_x = 0$, we were able to analytically obtain the quasienergy spectrum of such a slice, since for this case the time evolution operator can be effectively described by a block-diagonal 4×4 matrix; in other words, we obtained the effective Hamiltonian for $k_x = 0$. After looking at the winding of the effective Hamiltonian, we found that for this slice the edge states are topological, which means that the whole system is at least topologically weak. However, as for the gapful phase, a deeper analysis is needed for the case $\sigma = 1/\sqrt{3}$. We hope that our paper motivates further research about the system presented here.

ACKNOWLEDGMENTS

This project was supported by Dirección General de Asuntos del Personal Académico-Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (DGAPA-PAPIIT) Project No. 102717. P.R.-T. acknowledges financial support from Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (México). We gratefully thank M. Fruchart for helpful discussions.

APPENDIX A

Let us now compute the unitary operator $\mathbb{U}(\tau)$ for $\sigma = 1/\sqrt{3}$. Before entering into the detailed calculation, we first define the Hamiltonians \mathbb{H}_0 and \mathbb{H}_1 :

$$\mathbb{H}_l(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} 0 & \tilde{\mathbb{H}}_l(\mathbf{k}) \\ \tilde{\mathbb{H}}_l^\dagger(\mathbf{k}) & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A1})$$

where the label l can take the values $l = 0, 1$, and

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbb{H}}_0(\mathbf{k}) &= \begin{bmatrix} 1 & 1 + e^{-i\sqrt{3}k_y} \\ 1 + e^{i\sqrt{3}k_y} & e^{-i3k_x} \end{bmatrix}, \\ \tilde{\mathbb{H}}_1(\mathbf{k}) &= \begin{bmatrix} 1 & \gamma_1 + \gamma_2 e^{-i\sqrt{3}k_y} \\ \gamma_1 + \gamma_2 e^{i\sqrt{3}k_y} & e^{-i3k_x} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A2})$$

Thus, the perturbing Hamiltonian to H_0 is defined as $\delta\mathbb{H} = \mathbb{H}_1(\mathbf{k}) - \mathbb{H}_0(\mathbf{k})$, which takes the form

$$\delta\mathbb{H}(k_y) = \begin{bmatrix} 0 & \delta\tilde{\mathbb{H}}(k_y) \\ \delta\tilde{\mathbb{H}}(k_y) & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A3})$$

with

$$\delta\tilde{\mathbb{H}}(k_y) = \begin{bmatrix} 0 & \delta_1 + \delta_2 e^{-i\sqrt{3}k_y} \\ \delta_1 + \delta_2 e^{i\sqrt{3}k_y} & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A4})$$

where $\delta_{1,2} = \gamma_{1,2} - 1$. Note that the unperturbed and perturbed Hamiltonians do not commute. In fact, we have

$$[\delta\mathbb{H}(k_y), \mathbb{H}(\mathbf{k})] = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbb{C}}(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & \tilde{\mathbb{C}}(\mathbf{k}) \end{bmatrix}, \quad (\text{A5})$$

where

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbb{C}}(\mathbf{k}) &= 2i(\gamma_1 - \gamma_2) \sin(\sqrt{3}k_y) \sigma_z \\ &+ 2 \left[\delta_1 \sin\left(\frac{3k_x}{2}\right) + \delta_2 \sin\left(\frac{3k_x}{2} - \sqrt{3}k_y\right) \right] \\ &\times \sin\left(\frac{3k_x}{2}\right) \sigma_x \\ &+ 2 \left[\delta_1 \cos\left(\frac{3k_x}{2}\right) + \delta_2 \cos\left(\frac{3k_x}{2} - \sqrt{3}k_y\right) \right] \\ &\times \sin\left(\frac{3k_x}{2}\right) \sigma_y, \end{aligned} \quad (\text{A6})$$

where $\sigma_{x,y}$ are the 2×2 Pauli matrices and $\delta_{1,2} = \gamma_{1,2} - 1$ as before.

For obtaining the time evolution operator, we start by finding the eigenvalues and eigenvectors of the pristine system described by $\mathbb{H}_0(\mathbf{k})$. These eigenvalues are readily found by renormalizing one of the bipartite sublattices, since it is equivalent to consider the squared matrix $\mathbb{H}_0^2(\mathbf{k})$, as shown in [75,76]. Thus, the eigenvalues of $\mathbb{H}_0(\mathbf{k})$, denoted by $E_{1,2}(k_x, k_y)$, are

$$\begin{aligned} E_1(k_x, k_y) &= \sqrt{3 + 4 \cos(3k_x/2) \cos(\sqrt{3}k_y/2) + 2 \cos(\sqrt{3}k_y)}, \\ E_2(k_x, k_y) &= \sqrt{3 - 4 \cos(3k_x/2) \cos(\sqrt{3}k_y/2) + 2 \cos(\sqrt{3}k_y)}. \end{aligned} \quad (\text{A7})$$

To find the unitary transformation that diagonalizes $\mathbb{H}_0(\mathbf{k})$, care must be taken since the eigenvalues of $\mathbb{H}_0^2(\mathbf{k})$ are degenerate and thus are not necessarily eigenvectors of $\mathbb{H}_0(\mathbf{k})$. However, the eigenfunctions of $\mathbb{H}_0(\mathbf{k})$ correspond to pristine graphene, thus one can apply the Bloch theorem for the original Brillouin zone of graphene to get the proper eigenfunctions. Using the well-known solution for graphene and ordering the energies as $E_1, E_2, -E_1, -E_2$, we obtain the unitary transformation that diagonalizes $\mathbb{H}_0(\mathbf{k})$:

$$O = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbb{M}}_a & \tilde{\mathbb{M}}_a \\ \tilde{\mathbb{M}}_b & -\tilde{\mathbb{M}}_b \end{bmatrix}, \quad (\text{A8})$$

where

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbb{M}}_a(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} & -e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} \end{bmatrix}, \\ \tilde{\mathbb{M}}_b(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} e^{i\theta_1} & e^{i\theta_2} \\ e^{i\theta_1} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} & -e^{i\theta_2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{A9})$$

$\mathbf{a}_1 = (3, \sqrt{3})/2$ and $\mathbf{a}_2 = (3, -\sqrt{3})/2$ being the lattice vectors of pristine graphene, and

$$\begin{aligned} e^{i\theta_1} &= \frac{1}{E_1} [1 + 2e^{-3ik_x/2} \cos(\sqrt{3}k_y/2)], \\ e^{i\theta_2} &= \frac{1}{E_2} [1 - 2e^{-3ik_x/2} \cos(\sqrt{3}k_y/2)]. \end{aligned} \quad (\text{A10})$$

The next step is to transform Eq. (9) onto the basis in which \mathbb{H}_0 is diagonal, i.e., to perform $\mathbb{O}^\dagger \mathbb{U}(\tau) \mathbb{O} = \mathbb{U}'(\tau)$. Before doing that, let us reduce $\mathbb{U}(\tau)$ into a simpler form. To do that note that $(\delta\mathbb{H})^2 = [\delta E(k_y)]^2 \mathbb{I}_{4 \times 4}$, where $\mathbb{I}_{4 \times 4}$ is the 4×4 identity matrix and

$$\begin{aligned} \delta E(k_y) &= \sqrt{(\gamma_1 - 1)^2 + (\gamma_2 - 1)^2 + 2(\gamma_1 - 1)(\gamma_2 - 1) \cos(\sqrt{3}k_y)}. \end{aligned} \quad (\text{A11})$$

As a result, the exponential of $\delta\mathbb{H}$ can be written as

$$\exp[-i\tau(\delta H)] = \cos[\tau\delta E(k_y)]\mathbb{I} - i(\delta H) \frac{\sin[\tau\delta E(k_y)]}{\delta E(k_y)}, \quad (\text{A12})$$

$$\mathbb{U}'(\tau) = -i \frac{\sin(\tau\delta E)}{\delta E} \begin{bmatrix} [\cos(\tau\delta E) + \delta\tilde{\mathbb{H}}_+] \tilde{\mathbb{U}}_0(\tau) & \delta\mathbb{H}_- \tilde{\mathbb{U}}_0^*(\tau) \\ -\delta\mathbb{H}_- \tilde{\mathbb{U}}_0(\tau) & [\cos(\tau\delta E) - \delta\tilde{\mathbb{H}}_+] \tilde{\mathbb{U}}_0^*(\tau) \end{bmatrix}, \quad (\text{A16})$$

where $\mathbb{U}'(\tau) = \mathbb{O}^\dagger(\mathbf{k})\mathbb{U}(\tau)\mathbb{O}(\mathbf{k})$ and

$$\tilde{\mathbb{U}}_0(\tau) = \begin{bmatrix} e^{i\tau E_1} & 0 \\ 0 & e^{i\tau E_2} \end{bmatrix}. \quad (\text{A17})$$

APPENDIX B: PARTICULAR CASE $k_x = 0$

For $k_x = 0$ the time evolution operator $\mathbb{U}'(\tau)$ becomes block diagonal, each block being a 2×2 matrix. Hence, the time evolution operator, Eq. (A16), can be written as

$$\mathbb{U}'(\tau) = \begin{bmatrix} e^{i\tau\delta\tilde{h}(k_y)} e^{i\tau\tilde{h}_0(k_y)} & 0 \\ 0 & e^{-i\tau\delta\tilde{h}(k_y)} e^{-i\tau\tilde{h}_0(k_y)} \end{bmatrix}, \quad (\text{B1})$$

where

$$\begin{aligned} \delta\tilde{h}(k_y) &= \delta h(k_y) \delta\hat{\mathbf{h}} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \\ \tilde{h}_0(k_y) &= \mathbb{I}_{2 \times 2} + 2 \cos(\sqrt{3}k_y/2) \sigma_z, \end{aligned} \quad (\text{B2})$$

with $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, σ_i ($i = x, y, z$) being the 2×2 Pauli matrices written in the basis at which σ_z is diagonal, $\mathbb{I}_{2 \times 2}$ is the 2×2 identity matrix, and the components of $\delta\mathbf{h}$ are

$$\begin{aligned} \delta h^{(y)} &= (\gamma_1 - \gamma_2) \sin(\sqrt{3}k_y/2), \\ \delta h^{(z)} &= (\gamma_1 + \gamma_2 - 2) \cos(\sqrt{3}k_y/2). \end{aligned} \quad (\text{B3})$$

and the time evolution operator becomes

$$\mathbb{U}(\tau) = \left(\cos[\tau\delta E(k_y)] - i \frac{\sin[\tau\delta E(k_y)]}{\delta E(k_y)} \delta\mathbb{H}(k_y) \right) e^{-i\tau\mathbb{H}_0}. \quad (\text{A13})$$

Before transforming Eq. (9) into \mathbb{O} , we calculate $\delta\mathbb{H}'(k_y) = \mathbb{O}^\dagger \delta\mathbb{H}(k_y) \mathbb{O}$; after some algebraic operations, we have

$$\delta\mathbb{H}' = \begin{bmatrix} \delta\tilde{\mathbb{H}}_+ & \delta\tilde{\mathbb{H}}_- \\ -\delta\tilde{\mathbb{H}}_- & -\delta\tilde{\mathbb{H}}_+ \end{bmatrix}, \quad (\text{A14})$$

where

$$\delta\tilde{\mathbb{H}}_\pm = \tilde{\mathbb{M}}_b^\dagger \delta\tilde{\mathbb{H}} \tilde{\mathbb{M}}_a \pm \tilde{\mathbb{M}}_a^\dagger \delta\tilde{\mathbb{H}} \tilde{\mathbb{M}}_b. \quad (\text{A15})$$

Finally, the time evolution operator is given by

We have also defined the norm $\delta h(k_y) = |\delta\mathbf{h}|$.

By using the addition rule of $\text{SU}(2)$, Eq. (B1) can be written as follows:

$$\mathbb{U}'(\tau) = \begin{bmatrix} e^{i\tau\tilde{h}_{\text{eff}}(k_y)} & 0 \\ 0 & e^{-i\tau\tilde{h}_{\text{eff}}(k_y)} \end{bmatrix}, \quad (\text{B4})$$

where

$$\tilde{h}_{\text{eff}}(k_y) = \mathbb{I}_{2 \times 2} + \Omega(k_y) \hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (\text{B5})$$

where $\Omega(k_y)$ is given by

$$\begin{aligned} \cos[\tau\Omega(k_y)] &= \cos(\tau\delta h) \cos[2\tau \cos(\sqrt{3}k_y/2)] \\ &\quad - \frac{\delta h^{(z)}}{\delta h} \sin(\tau\delta h) \sin[2\tau \cos(\sqrt{3}k_y/2)]. \end{aligned} \quad (\text{B6})$$

Finally, the unit vector $\hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}}$ is

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{h}}_{\text{eff}} &= \frac{1}{\sin[\tau\Omega(k_y)]} \{ \delta\hat{\mathbf{h}} \sin(\tau\delta h) \cos[2\tau \cos(\sqrt{3}k_y/2)] \\ &\quad + \hat{e}_z \cos(\tau\delta h) \sin[2\tau \cos(\sqrt{3}k_y/2)] \\ &\quad - \delta h^{(y)} \hat{e}_x \sin(\tau\delta h) \sin[2\tau \cos(\sqrt{3}k_y/2)] \}. \end{aligned} \quad (\text{B7})$$

It is noteworthy that the quasienergies of the system are thus given by $\pm\tau\omega(k_y) = \pm\tau[\pm 1 + \Omega(k_y)]$ (see the main text).

- [1] X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
 [2] C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern, M. Freedman, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1083 (2008).
 [3] N. Ma, *Phys. B: Condens. Matter* **512**, 100 (2017).
 [4] I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
 [5] T. Yokoyama and S. Murakami, *Physica E* **55**, 1 (2014).
 [6] C.-T. Wu, B. M. Anderson, W.-H. Hsiao, and K. Levin, *Phys. Rev. B* **95**, 014519 (2017).

- [7] J. E. Moore, *Nature (London)* **464**, 194 (2010).
 [8] Y. L. Chen, J. G. Analytis, J.-H. Chu, Z. K. Liu, S.-K. Mo, X. L. Qi, H. J. Zhang, D. H. Lu, X. Dai, Z. Fang, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, *Science* **325**, 178 (2009).
 [9] I. I. Satija and G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **88**, 054204 (2013).
 [10] J. C. Avila, H. Schulz-Baldes, and C. Villegas-Blas, *Math. Phys. Anal. Geom.* **16**, 137 (2013).
 [11] J. Cayssol, B. Dóra, F. Simon, and R. Moessner, *Phys. Status Solidi* **7**, 101 (2013).

- [12] M. Thakurathi, A. A. Patel, D. Sen, and A. Dutta, *Phys. Rev. B* **88**, 155133 (2013).
- [13] G. Usaj, P. M. Perez-Piskunow, L. E. F. Foa Torres, and C. A. Balseiro, *Phys. Rev. B* **90**, 115423 (2014).
- [14] M. Thakurathi, K. Sengupta, and D. Sen, *Phys. Rev. B* **89**, 235434 (2014).
- [15] H. Dehghani and A. Mitra, *Phys. Rev. B* **92**, 165111 (2015).
- [16] C. Yuce, *Eur. Phys. J. D* **69**, 184 (2015).
- [17] K. Sun, Z. Gu, H. Katsura, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 236803 (2011).
- [18] V. Dal Lago, M. Atala, and L. E. F. Foa Torres, *Phys. Rev. A* **92**, 023624 (2015).
- [19] J. Klinovaja, P. Stano, and D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 176401 (2016).
- [20] N. Sedlmayr, J. M. Aguiar-Hualde, and C. Bena, *Phys. Rev. B* **93**, 155425 (2016).
- [21] H. Dehghani and A. Mitra, *Phys. Rev. B* **93**, 245416 (2016).
- [22] A. Agarwala, U. Bhattacharya, A. Dutta, and D. Sen, *Phys. Rev. B* **93**, 174301 (2016).
- [23] U. Bhattacharya, S. Dasgupta, and A. Dutta, *Eur. Phys. J. B* **89**, 216 (2016).
- [24] R. S. Akhyanov, A. L. Rakhmanov, A. V. Rozhkov, and F. Nori, *Phys. Rev. B* **94**, 125428 (2016).
- [25] A. Agarwala and V. B. Shenoy, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 236402 (2017).
- [26] P. Roman-Taboada and G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **95**, 115440 (2017).
- [27] M. Thakurathi, D. Loss, and J. Klinovaja, *Phys. Rev. B* **95**, 155407 (2017).
- [28] T. Kitagawa, E. Berg, M. Rudner, and E. Demler, *Phys. Rev. B* **82**, 235114 (2010).
- [29] T. Kitagawa, M. A. Broome, A. Fedrizzi, M. S. Rudner, E. Berg, I. Kassal, A. Aspuru-Guzik, E. Demler, and A. G. White, *Nat. Commun.* **3**, 882 (2012).
- [30] L. Jiang, T. Kitagawa, J. Alicea, A. R. Akhmerov, D. Pekker, G. Refael, J. I. Cirac, E. Demler, M. D. Lukin, and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 220402 (2011).
- [31] B. M. Fregoso, Y. H. Wang, N. Gedik, and V. Galitski, *Phys. Rev. B* **88**, 155129 (2013).
- [32] M. Benito, A. Gómez-León, V. M. Bastidas, T. Brandes, and G. Platero, *Phys. Rev. B* **90**, 205127 (2014).
- [33] T. Iadecola, T. Neupert, and C. Chamon, *Phys. Rev. B* **89**, 115425 (2014).
- [34] R. W. Bomantara, G. N. Raghava, L. Zhou, and J. Gong, *Phys. Rev. E* **93**, 022209 (2016).
- [35] T. Ochiai, *J. Phys.: Condens. Matter* **28**, 425501 (2016).
- [36] T. T. Heikkilä, N. B. Kopnin, and G. E. Volovik, *JETP Lett.* **94**, 233 (2011).
- [37] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, *Phys. Rev. B* **78**, 195125 (2008).
- [38] G. M. Graf and M. Porta, *Commun. Math. Phys.* **324**, 851 (2013).
- [39] D. Carpentier, P. Delplace, M. Fruchart, K. Gawdzki, and C. Tauber, *Nucl. Phys. B* **896**, 779 (2015).
- [40] F. Nathan and M. S. Rudner, *New J. Phys.* **17**, 125014 (2015).
- [41] G. E. Volovik, *J. Supercond. Novel Magn.* **26**, 2887 (2013).
- [42] F. M. D. Pellegrino, G. G. N. Angilella, and R. Pucci, *Phys. Rev. B* **84**, 195404 (2011).
- [43] F. M. D. Pellegrino, G. G. N. Angilella, and R. Pucci, *Phys. Rev. B* **85**, 195409 (2012).
- [44] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, *J. Phys.: Condens. Matter* **26**, 125302 (2014).
- [45] G. G. Naumis and P. Roman-Taboada, *Phys. Rev. B* **89**, 241404 (2014).
- [46] P. Roman-Taboada and G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **90**, 195435 (2014).
- [47] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, *2D Mater.* **2**, 025001 (2015).
- [48] P. Roman-Taboada and G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **92**, 035406 (2015).
- [49] Y. Hatsugai, *Solid State Commun.* **149**, 1061 (2009).
- [50] P. Delplace, D. Ullmo, and G. Montambaux, *Phys. Rev. B* **84**, 195452 (2011).
- [51] P. San-Jose, J. L. Lado, R. Aguado, F. Guinea, and J. Fernández-Rossier, *Phys. Rev. X* **5**, 041042 (2015).
- [52] J. Feilhauer, W. Apel, and L. Schweitzer, *Phys. Rev. B* **92**, 245424 (2015).
- [53] P. Delplace, A. Gómez-León, and G. Platero, *Phys. Rev. B* **88**, 245422 (2013).
- [54] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, *J. Phys.: Condens. Matter* **28**, 025301 (2016).
- [55] Z. Yan and Z. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 087402 (2016).
- [56] C. Dutreix, M. Guigou, D. Chevallier, and C. Bena, *Eur. Phys. J. B* **87**, 296 (2014).
- [57] V. M. Pereira, A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres, *Phys. Rev. B* **80**, 045401 (2009).
- [58] S.-M. Choi, S.-H. Jhi, and Y.-W. Son, *Phys. Rev. B* **81**, 081407 (2010).
- [59] G. G. Naumis, S. Barraza-Lopez, M. Oliva-Leyva, and H. Terrones, *Rep. Prog. Phys.* **80**, 096501 (2017).
- [60] M. Fruchart, *Phys. Rev. B* **93**, 115429 (2016).
- [61] M. Weinberg, C. Staarmann, C. Ischinger, J. Simonet, and K. Sengstock, *2D Mater.* **3**, 024005 (2016).
- [62] A. Cresti, N. Nemeč, B. Biel, G. Niebler, F. Triozon, G. Cuniberti, and S. Roche, *Nano Res.* **1**, 361 (2008).
- [63] R. M. Ribeiro, V. M. Pereira, N. M. R. Peres, P. R. Briddon, and A. H. C. Neto, *New J. Phys.* **11**, 115002 (2009).
- [64] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **88**, 085430 (2013).
- [65] P. A. Maksimov, A. V. Rozhkov, and A. O. Sboychakov, *Phys. Rev. B* **88**, 245421 (2013).
- [66] T. Mishra, T. G. Sarkar, and J. N. Bandyopadhyay, *Eur. Phys. J. B* **88**, 231 (2015).
- [67] M. S. Rudner, N. H. Lindner, E. Berg, and M. Levin, *Phys. Rev. X* **3**, 031005 (2013).
- [68] S. Rao, *J. Ind. Inst. Sci.* **96**, 145 (2016).
- [69] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1698 (1979).
- [70] Y. Yoshimura, K.-I. Imura, T. Fukui, and Y. Hatsugai, *Phys. Rev. B* **90**, 155443 (2014).
- [71] D. Y. H. Ho and J. Gong, *Phys. Rev. B* **90**, 195419 (2014).
- [72] N. Sedlmayr, J. M. Aguiar-Hualde, and C. Bena, *Phys. Rev. B* **91**, 115415 (2015).
- [73] X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Phys. Today* **63**, 33 (2010).
- [74] R. Winkler and H. Deshpande, *Phys. Rev. B* **95**, 235312 (2017).
- [75] G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **76**, 153403 (2007).
- [76] J. E. Barrios-Vargas and G. G. Naumis, *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 375501 (2011).