



Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ciencias

**FONONES FLEXURALES:
ECUACIÓN DE DIRAC
GENERALIZADA EN GRAFENO
CURVO**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

PRESENTA:

WILFRIDO ANTONIO GÓMEZ ARIAS

DIRECTOR DE TESIS:

DR. GERARDO GARCÍA NAUMIS



2013

”No hay nada más excitante que tratar de entender a la naturaleza, pero por encima de todo está la mujer”

Resumen

En el año 2004, se descubrió un nuevo material de sólo dos dimensiones con propiedades únicas y sorprendentes: el grafeno. Desde su aparición, ha logrado acaparar la atención de diversos grupos de investigación, ya que se considera que en un futuro próximo será útil en la fabricación de transistores más eficientes que los de silicio, procesadores más veloces, nuevos paneles solares, componentes delgados, elásticos y muy resistentes, entre muchos otros dispositivos. Visto al microscopio, el grafeno es como una sábana arrugada, es decir, plana con ligeras ondulaciones, aunque para grafeno a bajas temperaturas, su superficie puede ser considerada como plana. Así que, para el estudio del comportamiento de los portadores de carga, se puede emplear la ecuación bidimensional de Dirac. Sin embargo, cuando el espacio bidimensional ya no es plano sino ondulado, lo anterior deja de ser cierto, pues aquí deben considerarse las partículas en un espacio curvo. Por lo tanto, en este trabajo se propone una generalización de la ecuación bidimensional de Dirac con el fin de describir los portadores de carga moviéndose en grafeno curvo, que es el caso de temperaturas superiores a 10 K debido a la presencia de fonones flexurales o grafeno doblado. La interacción se toma en cuenta al considerar una métrica inducida con el mismo enfoque que utiliza la relatividad general para la descripción de las partículas fermiónicas que se mueven en un espacio-tiempo curvo. La ecuación resultante permite incluir de forma natural la presencia de ramas de fonones, así como de un campo electromagnético externo. No obstante, para grafeno doblado, modelado mediante un perfil geométrico tipo sinusoidal, y que ha sido observado experimentalmente cuando el grafeno es crecido sobre un sustrato de hierro, el problema puede ser resuelto a partir de una ecuación de Mathieu con un parámetro complejo. Las soluciones resultantes muestran el fenómeno de resonancia paramétrica. El patrón de resonancia es la misma que en el caso de las soluciones de grafeno bajo radiación electromagnética, que además conduce una relación de recurrencia que da lugar a regiones de energías prohibidas, lo que nos permitiría controlar y modificar el flujo de los electrones. De esta manera, con sólo deformar la superficie de grafeno se podrían construir compuertas electrónicas y diseñar nuevos transistores. Los resultados obtenidos se publicaron en la revista *Physica B: Condensed Matter*, bajo el título *Bending and flexural phonon scattering: Generalized Dirac equation for an electron moving in curved graphene*.

Agradecimientos

A mi hermosa familia, mi madre la Sra. Antonia, mi padre el Sr. Wilfrido, mis hermanos, Paco, Miguel, Jesús, Nancy, Daniela y Alex, que en todo momento me ha apoyado con su amor y cariño.

A la familia Robles, a quienes también considero como parte de mi familia.

Al Dr. Gerardo García Naumis por haberme dado la oportunidad de trabajar con él, por su apoyo en un momento crucial de mi desarrollo académico, por la gran confianza que en todo momento depositó en mí y por haber compartido sus ideas conmigo, ideas que en última instancia están marcando mi desarrollo profesional.

A la Dra. Gabriela Murguía, a la Dra. Rosario Paredes, al Dr. Mathieu y al Dr. Jemal por la paciencia de leer este trabajo y por sus atinadas observaciones.

A mis dos cuñadas hermosas, Brenda y Cristy, porque siempre han estado allí para apoyarme.

A mis amigas hermanas, Rosa y Chío, por todo lo que tienen que soportarme.

A mis amigos hermanos, Sheco y Dari, por que sé que nunca me fallarán.

A mi novia hermosa Karla, que sin duda alguna me hace muy feliz.

Al profesor Abelardo, Borrego y Esteban, porque nunca he dejado de aprender de ellos.

A mis amigos de la facultad, por todos los momentos que me ayudaron a escapar de la rutina.

A mis amigos de casa, Carlos, Fabio y Lucio, porque siempre han estado conmigo en las buenas y en las malas desde el inicio de la carrera, por las charlas en la cocina, por las desveladas jugando Risk y videojuegos, también por las cascaritas de Basquetbol y Futbol.

Y no podía faltar mi buen amigo César y mi agradable amiga Panie. Gracias por acompañarme a realizar los proyectos de Ciencia para Jóvenes y enseñarme lo divertido que es bailar al ritmo de la salsa.

Gracias finalmente a la UNAM por ser para mí y para muchos otros, una segunda casa. Espero sinceramente que este trabajo sea digno de esta institución...

Índice general

Resumen	III
Agradecimientos	IV
Índice de Figuras	VII
1. Introducción	1
2. El carbono y sus alotropías	3
2.1. El carbono	3
2.2. Formas alotrópicas del carbono	4
2.2.0.1. Grafito y Diamante	4
2.2.0.2. Orbitales híbridos	5
2.2.0.3. Fullerenos y nanotubos de carbono	8
2.2.0.4. Hacia el descubrimiento del grafeno	10
3. Grafeno	11
3.1. ¿Qué es el grafeno?	11
3.2. ¿Qué hace al grafeno un material único?	12
3.3. Física básica del grafeno	14
3.3.1. Estructura	14
3.3.2. Propiedades electrónicas	15
3.4. Método de obtención	18
3.5. Futuras aplicaciones	19
4. Ecuación de Dirac generalizada en grafeno curvo	20
5. Soluciones aproximadas	24
6. Conclusión	31
A. Ecuación de Dirac	33
A.1. Ecuación de Dirac en 3+1 dimensiones	33
A.1.1. Forma covariante de la Ecuación de Dirac en 3+1 dimensiones	35
A.1.2. Partícula en movimiento	36

A.2. Ecuación de Dirac en 2+1 dimensiones	37
A.3. Ecuación de Dirac en grafeno plano	38
B. Ecuación covariante de Dirac en espacios curvos	40
Bibliografía	47

Índice de figuras

2.1. Átomo del carbono	3
2.2. Grafito	4
2.3. Diamante	4
2.4. Hibridación	6
2.5. Orbitales sp^3	6
2.6. Orbitales sp^2	7
2.7. Orbitales sp	8
2.8. Fullerenos	9
2.9. Nanotubo de carbono	9
3.1. Grafeno	11
3.2. Grafeno como bloque de construcción básico	12
3.3. Grafeno vs otros materiales	13
3.4. Subredes unitarias del grafeno	14
3.5. Nivel de Fermi: bandas de energías	15
3.6. Enlace σ en el grafeno	16
3.7. Enlace π en el grafeno	16
3.8. Estructura de banda completa para el grafeno	17
3.9. Método para obtener grafeno	18
4.1. Grafeno plano y grafenos curvo	21

A mi madre Antonia Arias López
A mi padre José Wilfrido Gómez Ávila

A mis hermanas Nancy y Daniela
A mis hermanos Paco, Miguel, Jesús y Alex

Capítulo 1

Introducción

El grafeno da lugar a propiedades sorprendentes y únicas, tales como alta movilidad electrónica [1], alta conductividad térmica [2] y alta transparencia óptica [3], que se cree serán importantes para futuras aplicaciones [4–9]. Sin embargo, hay ciertas discrepancias en los valores de la movilidad electrónica, dependiendo de que si las muestras son suspendidas o están en un sustrato [10, 11]. A bajas temperaturas, la dispersión por impurezas puede ser la responsable de este efecto, que finalmente conduce a una transición metal-aislante, ya que el borde de la movilidad aparece cerca de la energía de Fermi [12], como se ha confirmado en el grafeno dopado con H [13]. En contraste, por encima $T > 10K$ tales discrepancias se cree que son una consecuencia del papel fundamental de las vibraciones de la superficie del grafeno (conocido como fonones flexurales [14]), causado por la dispersión de electrones, como se ha demostrado muy recientemente mediante la aplicación de tensión a las hojas de grafeno [11]. Desde el punto de vista microscópico, los resultados de la dispersión generan cambios en las distancias entre los átomos, dando lugar a fluctuaciones de los orbitales π [15]. Además, dado que el grafeno puede ser curvado mediante la aplicación de tensión, se ha propuesto hacer ingeniería de tensión con el fin de adecuar y modificar las propiedades electrónicas [16]. Cabe mencionar también, que el corrugamiento en el grafeno, junto con la aplicación de longitudes de onda larga, produce un pseudo-dispositivo magnético que puede modificar la propagación de los electrones [17].

Por otro lado, se sabe que el comportamiento de los portadores de carga en el grafeno puede ser adecuadamente descrita por la ecuación bidimensional de Dirac (ver apéndice A). Dicha ecuación también permite evaluar la interacción entre los portadores de carga y los fonones, a través de acoplamiento mínimo con un pseudo-potencial [14]. Sin embargo, siempre que la descripción de la hoja de grafeno se mantenga estrictamente plana, los llamados modos de flexión y de tensión, como resultado de las deformaciones

transversales, no pueden ser tomados en cuenta en una forma geométrica natural. Es por ello, que en este trabajo de tesis se propone utilizar el conocido formalismo del cálculo covariante con el fin de adaptar la ecuación de Dirac a una superficie curva y así aplicarlo al grafeno curvo, tomando en consideración la interacción electrón-fonón.

En los capítulos siguientes se muestra el desarrollo del trabajo de esta tesis.

En el capítulo 2 se da una breve descripción del átomo de carbono y sus formas alotrópicas, como lo son: el grafito, el diamante, los fullerenos, los nanotubos de carbono y el recientemente descubierto, grafeno.

En el capítulo 3 se explica qué es el grafeno y que lo hace un material único, así como su física básica (estructura y propiedades electrónicas), método de obtención y futuras aplicaciones.

En el capítulo 4 se estudia la ecuación de Dirac para una superficie curva. Esta nueva ecuación ahora se adapta al grafeno curvo con las interacciones electrón-fonón, dando como resultado una ecuación de Dirac generalizada.

En el capítulo 5 se expone una solución particular a la ecuación generalizada de Dirac en grafeno curvo, es decir, el grafeno es modelado mediante un perfil geométrico tipo sinusoidal, como se ha observado experimentalmente cuando el grafeno es crecido sobre un sustrato de hierro. Aquí se llegan a soluciones tipo Mathieu pero con un parámetro complejo, el cual nos dice que existe un patrón de resonancia. Este patrón de resonancia es característico del grafeno plano sometido a radiación electromagnéticas, que además muestra una relación de recurrencia que da lugar a regiones de energías prohibidas.

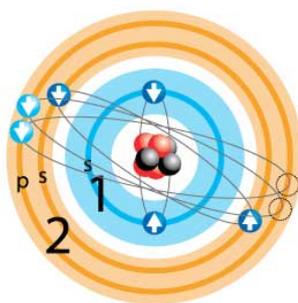
Por último en el capítulo 6 se presentan las conclusiones generadas y perspectivas.

Capítulo 2

El carbono y sus alotropías

2.1. El carbono

El carbono es el elemento químico alrededor del cual ha evolucionado la vida, es el más conocido e intrigante de la tabla periódica y la base de toda la química orgánica; todas las moléculas biológicas importantes, con excepción de la molécula del agua, contienen carbono. Tiene una configuración electrónica $1s^2 2s^2 2p^2$. Esta configuración, de acuerdo al modelo de capas, nos dice que hay seis electrones orbitando alrededor del núcleo y dos ellos se encuentran en la capa más externa (orbital $2p$), ver figura 2.1. Estos electrones, conocidos como electrones de valencia, presentan la facilidad de formar enlaces, lo que le permite al carbono conectarse entre sí de muchas maneras y dar lugar a diversas estructuras tanto moleculares como cristalinas. Tales estructuras son denominadas comúnmente formas alotrópicas del carbono, y aquí se ubican el grafito y el diamante.



6 - Carbon (C)

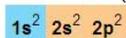


FIGURA 2.1: Configuración electrónica del carbono.

2.2. Formas alotrópicas del carbono

2.2.0.1. Grafito y Diamante

El grafito, elemento usado para fabricar el lápiz común (Fig. Izquierda 2.2), es la forma alotrópica más estable del carbono. Está constituido por láminas planas de átomos de carbono ordenadas en forma hexagonal y paralelas entre sí (Fig. Derecha 2.2). Cada una de estas láminas están unidas débilmente mediante enlaces de Van der Waals, y esto permite a las capas deslizarse horizontalmente con facilidad. Por ello, el grafito posee un alto grado de anisotropía, de modo que sus propiedades físicas varían notablemente según la dirección en que se haga la medida. Por otro lado, el diamante (Fig. Izquierda 2.3) es la segunda forma alotrópica más estable del carbono, sin embargo, es un material con características físicas sorprendentes, muchas de las cuales derivan del fuerte enlace covalente tridimensional entre sus átomos (Fig. Derecha 2.3), que hace al diamante una estructura mucho más dura que el grafito.

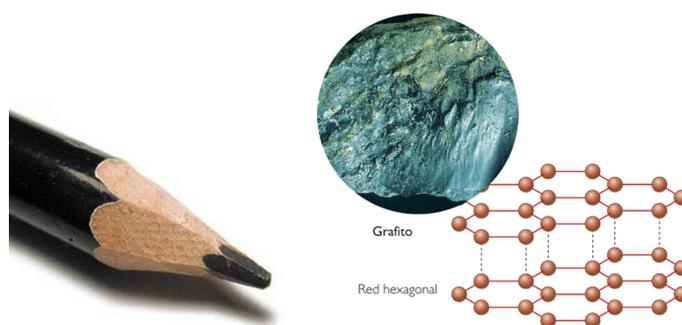


FIGURA 2.2: El grafito, elemento usado para lápiz común (izquierda) y láminas planas de átomos de carbono que conforman al grafito (derecha).

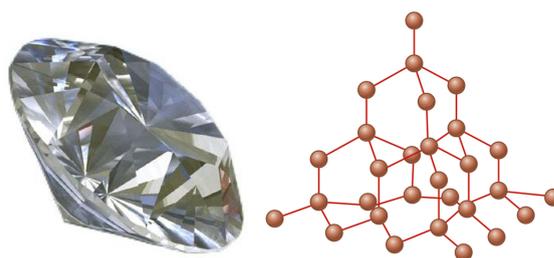


FIGURA 2.3: El diamante (izquierda) y su estructura (derecha).

Para poder entender cómo es que surgen estas formas alotrópicas del carbono, es necesario explicar el proceso de hibridación, que consiste en la combinación lineal de orbitales atómicos distintos, que dan origen a los orbitales híbridos.

2.2.0.2. Orbitales híbridos

De acuerdo con la configuración electrónica del átomo de carbono, se tiene que sólo los dos electrones que ocupan el orbital $2p$ están disponibles para formar enlaces, sin embargo, debido a que la diferencia de energía entre el orbital $2s$ y $2p$ es muy pequeña, son posibles distintos tipos de hibridación en el momento en que se produce una interacción del átomo de carbono con otros átomos cercanos. El proceso de hibridación comienza cuando uno de los electrones del orbital $2s$ salta a un orbital $2p$, de tal manera que el átomo de carbono se encuentra en un estado excitado (antes de la hibridación). Finalmente se produce una mezcla o combinación de orbitales sencillos y orbitales en un estado excitado. Dicha mezcla permite formar orbitales híbridos equivalentes (Fig. 2.4). Dependiendo de la cantidad de orbitales que participen en el proceso de la mezcla, existirán varios tipos de hibridación. Estos orbitales híbridos resultantes poseen orientaciones espaciales bien definidas que dan lugar a fuertes enlaces covalentes llamados σ ; es decir, los átomos están disponibles para la unión a través de sus electrones en el último orbital.

En la denominada hibridación sp^3 o tetragonal, que se obtiene al combinar los orbitales $2s$, $2p_x$, $2p_y$ y $2p_z$, se forman cuatro orbitales híbridos orientados en el espacio, dispuestos en una estructura con forma de tetraedro (Fig. 2.5). Esta hibridación es la base de la estructura del diamante.

Otro tipo de hibridación es la que se conoce como hibridación sp^2 o trigonal, que se obtiene a partir de las combinaciones orbitales $2s$, $2p_x$ y $2p_y$, e involucra la formación de tres orbitales híbridos en el plano x-y con una separación angular de 120° entre sí (Fig. 2.6). Esta hibridación da lugar a la estructura hexagonal de los átomos de cada una de las capas de las que se forma el grafito. Obsérvese que hay un orbital deslocalizado que permanece sin hibridar, el $2p_z$. Este es un orbital perpendicular al plano formado por los orbitales híbridos, y se halla disponible para la formación de un enlace π con otro átomo. Son enlaces covalentes pero más débiles que los enlaces σ , ya que existe un traslape significativamente menor entre los componentes de los orbitales $2p_z$, debido a la orientación paralela.

Por último se tiene la hibridación sp o diagonal, que se obtiene al combinar los orbitales $2s$ y $2p$, el cual produce 2 orbitales híbridos formando entre sí un ángulo de 180° (Fig. 2.7). Esto hace que las moléculas que se forman sean lineales. A parte de los orbitales

hibridados también se tienen dos orbitales deslocalizados π que no entran en el proceso de hibridación; ejemplos de hibridación sp los encontramos en la molécula CO_2 . Es importante hacer la observación que el proceso de hibridación no se produce en átomos aislados, sino más bien, surge de la interacción del átomo de carbono con otros átomos cercanos, ya sean del mismo tipo u otros.

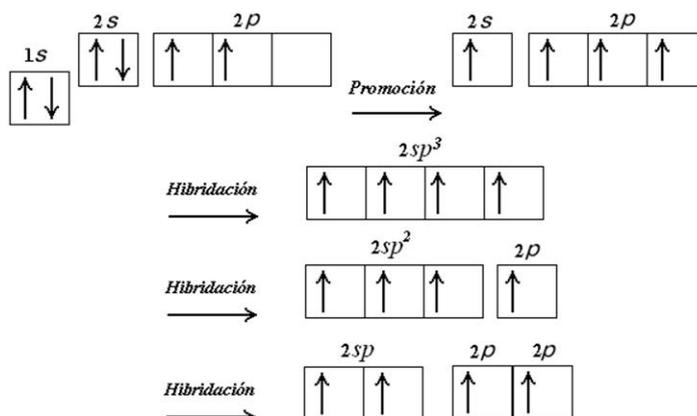


FIGURA 2.4: Hibridación de los orbitales atómicos del átomo de carbono.

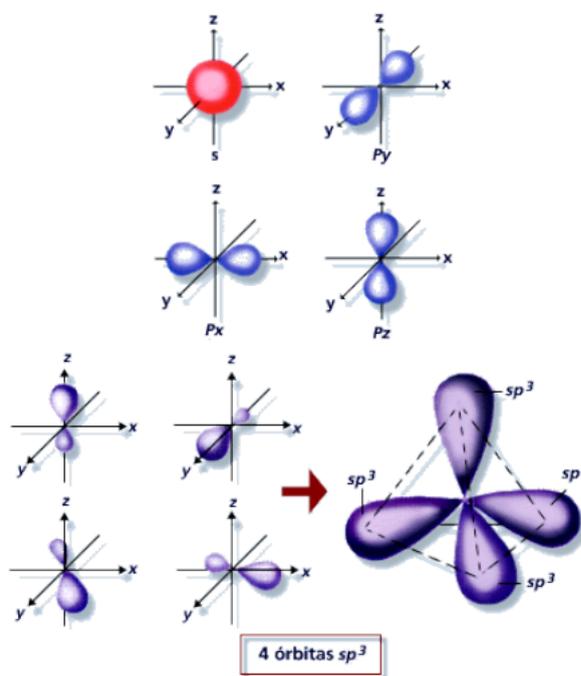


FIGURA 2.5: Orbitales atómicos de valencia $2s$, $2p_x$, $2p_y$ y $2p_z$ del carbono (arriba) y orbitales atómicos conocidos como híbridos $[sp^3] = a2s + b2p_x + c2p_y + d2p_z$, donde los coeficientes de mezcla a , b , c y d , indican el aporte de cada uno de los orbitales atómicos originales a la dirección tetraédrica requerida. Hay 4 posibilidades (abajo). Ref. [18].

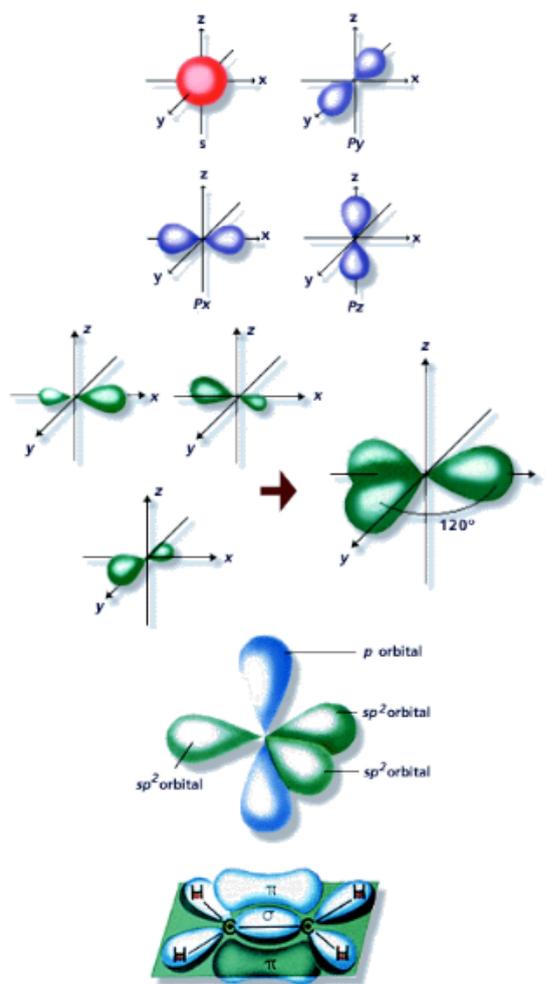


FIGURA 2.6: Orbitales atómicos de valencia $2s$, $2p_x$, $2p_y$ y $2p_z$ del carbono (izquierda arriba) y orbitales atómicos conocidos como híbridos $[sp^2] = a2s + b2p_x + c2p_y$, donde los coeficientes de mezcla a , b y c , indican el aporte de cada uno de los orbitales atómicos originales a la dirección trigonal requerida; es decir, se generan tres orbitales híbridos en el plano $x - y$, dirigidos a 120° entre sí (derecha arriba). Obsérvese que aun queda libre un orbital atómico de valencia $2p_z$ que no participa en esta hibridación trigonal, por lo que efectivamente la forma final es la que se muestra, con el orbital $2p_z$ perpendicular a los sp^2 (abajo). Cada sp^2 dispone de un electrón para compartir y formar enlaces, ya sean con átomos iguales (tipo sigma σ) o átomos diferentes, y el $2p_z$ también dispone de un electrón para para formar enlaces de características π . Imagen tomada de [18].

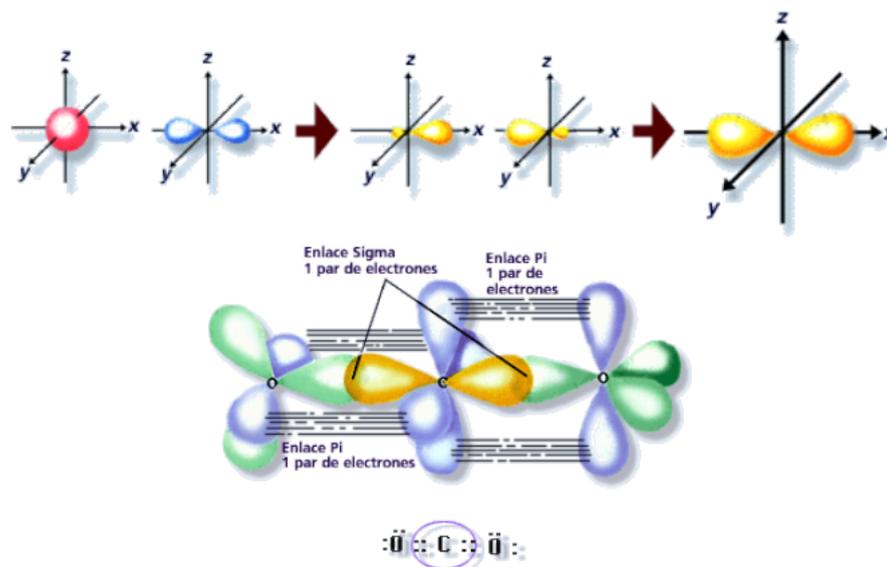


FIGURA 2.7: Orbitales atómicos de valencia $2s$ y $2p_x$ del carbono (izquierda arriba) y orbitales atómicos conocidos como híbridos $[sp] = a2s + b2p_x$, donde los coeficientes de mezcla a y b , indican el aporte de cada uno de los orbitales atómicos originales. Así se generan formas lineales de enlaces a 180° entre sí (derecha arriba). Además podemos decir que hay 2 orbitales tipo $2p$ libres que no participan en la hibridación: $2p_y$ y $2p_z$. En la parte de abajo se encuentra la molécula CO_2 , allí se muestra el átomo de carbono (hibridación sp más 2 orbitales atómicos originales tipo $2p$ perpendiculares entre sí) y los oxígenos O (hibridación sp^2 más un orbital atómico original tipo $2p$ perpendicular), uno de ellos girado 90° alrededor de la línea de unión. Imagen tomada de [18].

2.2.0.3. Fullerenos y nanotubos de carbono

A pesar de que el enlace del carbono ha sido uno de los más estudiados, en 1985 se descubrió una nueva forma del carbono [19] (de hecho una familia entera de nuevas formas). En esta nueva alotropía los átomos de carbono presentan una hibridación intermedia entre el orbital híbrido sp^2 y sp^3 . Este tipo de hibridación hace posible que los átomos de carbono puedan combinarse formando hexágonos y pentágonos en estructuras tridimensionales cerradas. El primer miembro de esta familia y el mejor conocido tiene una estructura esférica, compuesta por 60 átomos de carbono (Fig. 2.8). Esta bola de dimensión cero y fórmula C_{60} , similar a un balón de fútbol, se conoce también como buckminsterfullereno o simplemente fullereno [19, 20].

En 1952 nuevas estructuras del carbono se habían descubierto: “los nanotubos de carbono” (Fig. 2.9). Pero nadie les dio tanta importancia, no fue si no hasta 1991 cuando S. Iijima [21] los redescubrió para la ciencia occidental y notó una serie de propiedades sorprendentes. Los nanotubos de carbono son considerados como una forma alotrópica del carbono de dimensión uno. En esta forma alotrópica los átomos de carbono presentan también una hibridación intermedia. Este tipo de hibridación hace posible que los

átomos de carbono puedan combinarse formando hexágonos y heptágonos, dando lugar, al contrario de los fullerenos, a una curvatura inversa. Asimismo presenta un orbital deslocalizado que permite formar enlaces π .

Ambas formas alotrópicas del carbono tanto los fullerenos como los nanotubos de carbono han sido extensivamente estudiadas debido a sus interesantes propiedades mecánicas, ópticas y eléctricas [22]. Sin embargo, faltaba un compuesto bidimensional del carbono: “el grafeno”.

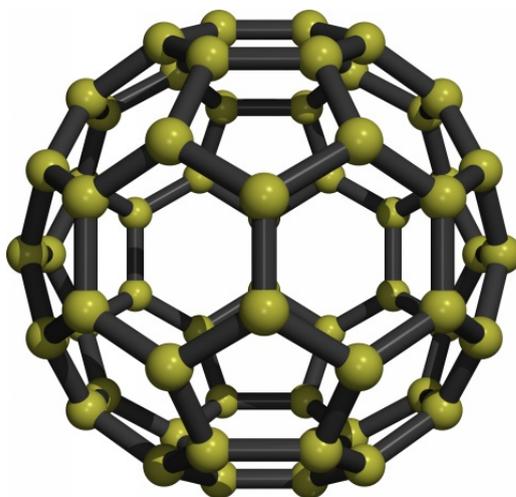


FIGURA 2.8: Molécula de carbono (C_{60}) conocida también como buckminsterfullereno o simplemente fullereno.

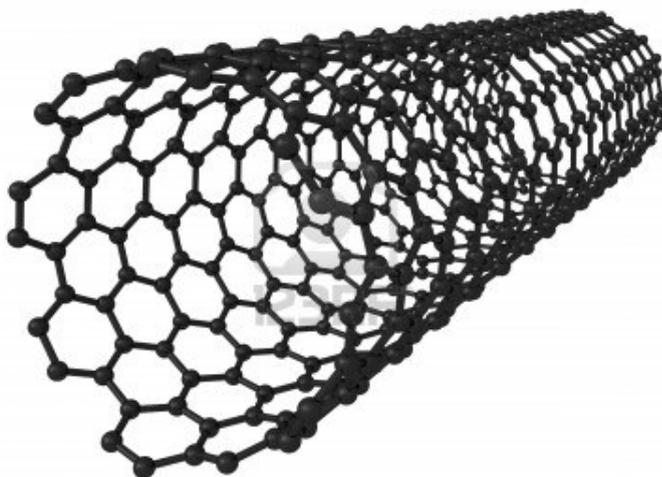


FIGURA 2.9: Nanotubo de carbono.

2.2.0.4. Hacia el descubrimiento del grafeno

Como se ha mencionado anteriormente, ya se conocían varias formas alotrópicas del carbono; fullerenos (dimensión cero), nanotubos (dimensión uno), grafito y diamante (dimensión tres). Por lo tanto, la búsqueda del grafeno (dimensión dos) era de esperarse, pues el grafito se forma apilando capas planas de átomos de carbono de dimensión dos, por lo que cada una de estas capas es precisamente un cristal de grafeno. Afortunadamente, en el grafito la interacción entre capas es mucho más débil que la interacción interna en cada cristal de grafeno, donde los átomos están unidos mediante enlaces covalentes, el cual es muy fuerte. Esto permite que se puedan utilizar en las puntas de lápiz o lubricantes. Entonces podría pensarse que la obtención de grafeno era algo simple de realizar. Sin embargo, existían dos problemas: aislar y caracterizar un cristal de grafeno, y lograr vencer la supuesta imposibilidad teórica de obtener un material bidimensional [23]. Hasta el año 2004 no se creía posible su existencia como entidad aislada, ya que se suponía que los cristales estrictamente bidimensionales eran termodinámicamente inestables. El argumento fundamental que reside detrás de tal creencia se debe a L. Landau y R. Peierls, ya que setenta años atrás demostraron que tal inestabilidad se debía a las fluctuaciones térmicas en redes cristalinas de baja dimensionalidad, lo que produciría desplazamientos atómicos comparables a las distancias interatómicas a cualquier temperatura finita [23], dando lugar a la desintegración del cristal. Más tarde Mermin extendería este resultado a sistemas bidimensionales más generales, estableciendo que no existe orden de largo alcance en dos dimensiones [23]. Esta hipótesis se refuerza por numerosas pruebas experimentales, entre ellas se encuentra el hallazgo de que la temperatura de fusión de láminas delgadas decrece rápidamente al disminuir su espesor, provocando que la lámina se vuelva inestable para grosores correspondientes aproximadamente a una docena de monocapas [23]. Esto fuerza a los cristales bidimensionales a tomar una variedad de estructuras tridimensionales que les proporcione estabilidad a costa de la pérdida de la bidimensionalidad. De esta manera se suponía que el grafeno únicamente podía existir como constituyente básico de otros materiales grafiticos, aunque sin poseer una entidad real como objeto aislado. No obstante en 2004, en la Universidad de Manchester, dos científicos rusos, Andre Geim y Konstantin Novoselov, obtuvieron por primera vez láminas individuales de grafeno empleando un método conocido como exfoliación micromecánica o “cinta pegante” [24]. Seis años más tarde Geim y Novoselov recibirían el premio Nobel de física por su notable descubrimiento.

Capítulo 3

Grafeno

3.1. ¿Qué es el grafeno?

El grafeno es un material nanométrico de dos dimensiones y el primer ejemplo en el mundo real. Consiste en átomos de carbono arreglados en forma de una red hexagonal dando la apariencia como la de un panal de abejas (Fig. 3.1). Fue obtenido a partir del grafito en 2004 por los científicos rusos Andre Geim y Konstantin Novoselov [24]. Es un bloque de construcción básico para los materiales grafiticos. Puede ser envuelto en fullerenos (0D), enrollados en nanotubos (1D) o grafito apilado (3D), como se muestra en la Fig. 3.2. Posee propiedades eléctricas, térmicas, mecánicas y ópticas jamás antes descubiertas por un sólo material, por lo que ofrece y promete una gran cantidad de aplicaciones tecnológicas, así como también, mucha investigación en ciencia básica.

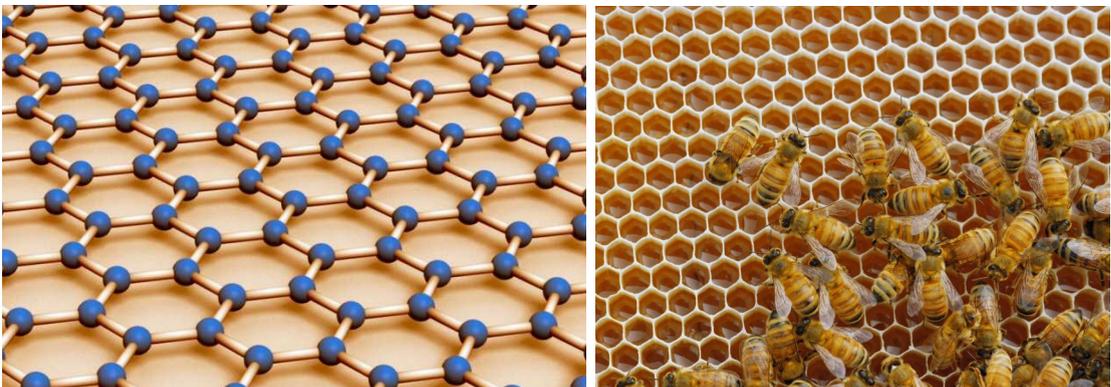


FIGURA 3.1: Estructura hexagonal de los átomos de grafeno (izquierda) y panal de abejas (derecha).

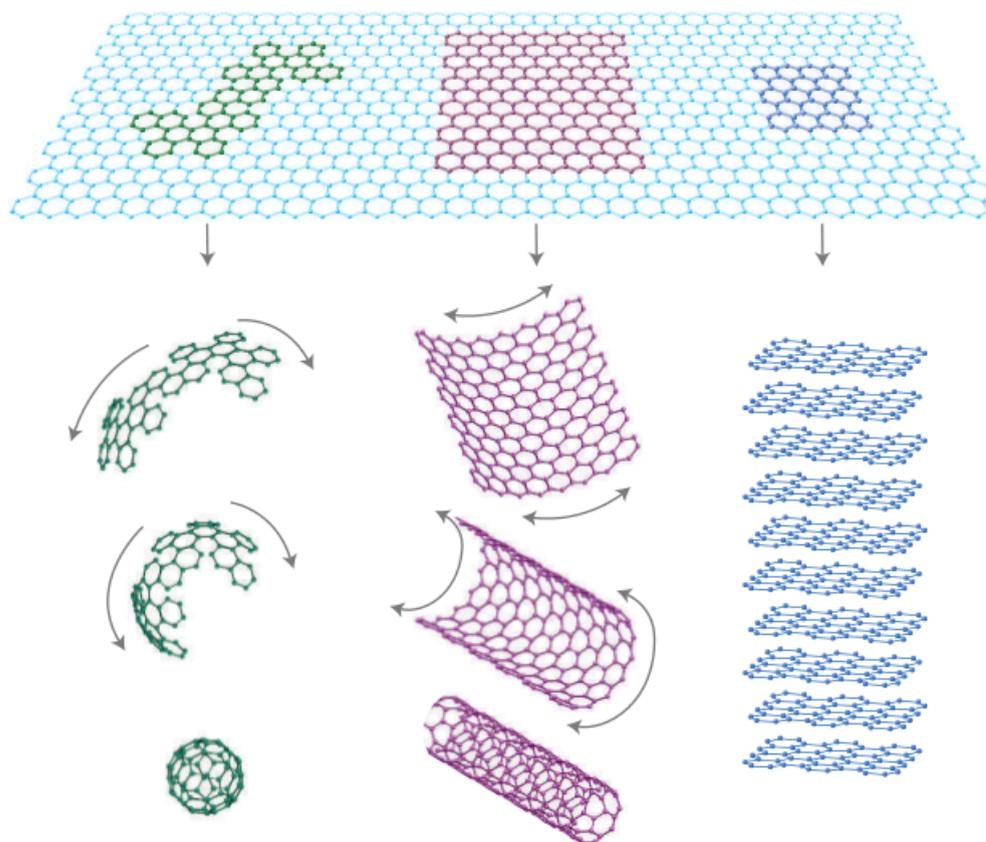


FIGURA 3.2: El grafeno como bloque de construcción básico. Se puede curvar en fullerenos (0D), enrollar en nanotubos (1D) y apilarse en grafito (3D). Ref. [23]

3.2. ¿Qué hace al grafeno un material único?

A diferencia de las otras formas del carbono, el grafeno da lugar a propiedades sorprendentes y únicas, esto se debe a la disposición que tienen sus átomos. Los electrones se mueven a través de él como si no tuvieran masa (como los fotones), con una movilidad electrónica 100 veces mayor que la del silicio y trescientas veces menor que la velocidad de la luz [1, 25]. A temperatura ambiente, posee una enorme longitud de coherencia cuántica, es decir los electrones pueden viajar a través de varias micras de grafeno sin dispersión; un orden de magnitud mayor que cualquier otro material. A pesar que es el material más fino conocido (su grosor no excede el de un átomo de carbón), también es el más fuerte jamás registrado: 100 veces más fuerte que el acero [25]. Se ha dicho recientemente que una capa de grafeno podría sostener un elefante sobre un lapicero. Además, el grafeno es uno de los mejores conductores del calor (superior que el diamante) [2, 25]. En la Fig. 3.3 se muestran las comparaciones gráficas de algunas propiedades del grafeno con las de otros materiales.

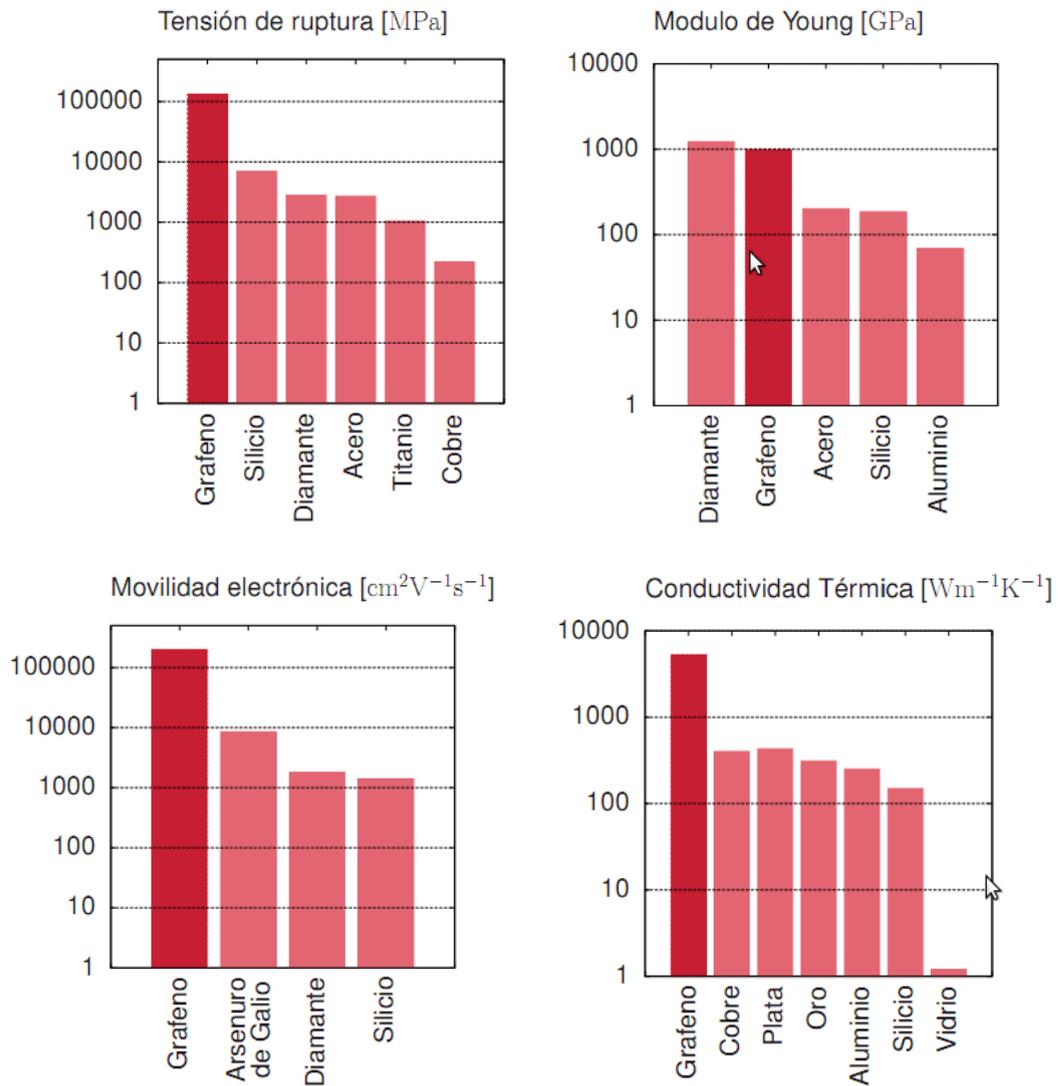


FIGURA 3.3: Grafeno vs otros materiales. Imagen tomada de [25].

Aparte de tener alta movilidad electrónica [1, 25], alta conductividad térmica [2, 25] y ser muy resistente [25], el grafeno es aún más atractivo debido a su transparencia óptica: “sólo el 2.3% de la luz blanca es absorbida” [3]. Es tan denso, que ni siquiera el gas helio (el átomo más pequeño) lo puede atravesar [26]. Se extiende con facilidad y es muy flexible, lo que permite la capacidad de doblarse (otros materiales resistentes se romperían). Asimismo es muy sensible a cualquier molécula que se deposite en su superficie [27]. También si se le aplica una señal eléctrica de cierta frecuencia, genera otra onda del doble o el triple de frecuencia, es decir, funciona como un multiplicador de frecuencias; por lo que permitirá trabajar a frecuencias más altas de las actuales, en el rango de 500 a 1000 gigahertz [28].

3.3. Física básica del grafeno

3.3.1. Estructura

La estructura cristalina del grafeno consiste de una red hexagonal. Esta red puede verse como la composición de dos subredes unitarias triangulares no equivalentes A y B , con una base de dos átomos de carbono por cada subred, como se muestra en la Fig. 3.4 (izquierda). La utilización de estas dos subredes triangulares proviene del hecho que la red triangular es una red de Bravais, mientras que la red hexagonal original del grafeno no lo es.

Los vectores unitarios de cada red triangular se pueden escribir como:

$$a_1 = \frac{a_0}{2}(3, \sqrt{3}), \quad a_2 = \frac{a_0}{2}(3, -\sqrt{3}), \quad (3.1)$$

donde $a_0 \approx 1.42 \text{ \AA}$, es la distancia carbono-carbono.

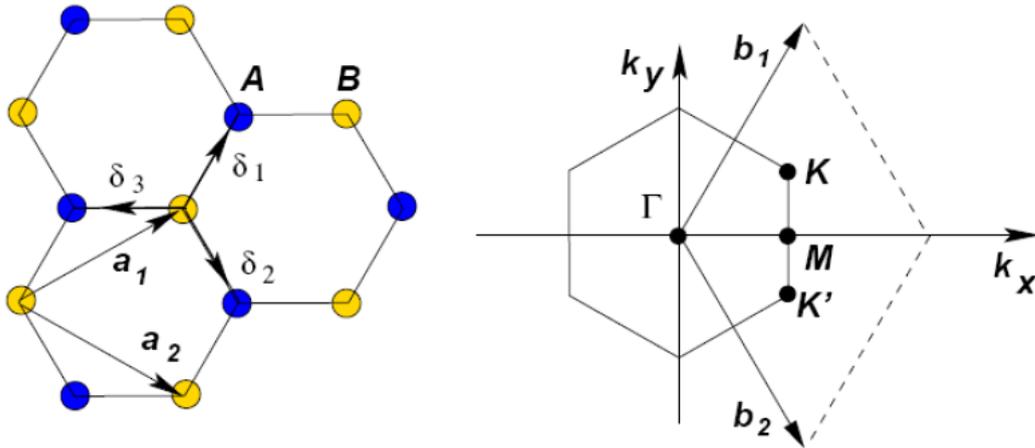


FIGURA 3.4: (Izquierda) Los átomos azules forman la subred unitaria triangular A y los átomos amarillos la subred unitaria triangular B. (Derecha) Los puntos de Dirac K y K' de la zona de Brillouin del grafeno. Imagen tomada de [14].

Por otro lado, los vectores unitarios de la red recíproca son:

$$b_1 = \frac{2\pi}{3a_0}(1, \sqrt{3}), \quad b_2 = \frac{2\pi}{3a_0}(1, -\sqrt{3}). \quad (3.2)$$

Los tres vectores de los átomos vecinos en el espacio real están dados por:

$$\delta_1 = \frac{a_0}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \delta_2 = \frac{a_0}{2}(1, -\sqrt{3}) \quad y \quad \delta_3 = -a_0(1, 0) \quad (3.3)$$

Existen también los puntos \mathbf{K} y \mathbf{K}' , como se muestra en la Fig. 3.4 (derecha); llamados puntos de Dirac, que se encuentran en las esquinas de la zona de Brillouin del grafeno:

$$\mathbf{K} = \left(\frac{2\pi}{3a_0}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a_0} \right), \quad \mathbf{K}' = \left(\frac{2\pi}{3a_0}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a_0} \right). \quad (3.4)$$

Todas las propiedades eléctricas que dan al grafeno ese carácter especial se centran principalmente en torno a estos puntos, ya que su particular estructura de bandas electrónicas: el famoso cono de Dirac, formado por la banda de valencia y la banda de conducción, se juntan en estos puntos a una energía conocida como energía de Fermi. Obsérvese [29] (Fig. 3.5) que si el nivel de Fermi (ε_f) está en la banda de conducción nos encontramos ante un metal, ya que los electrones circulan libremente por esta banda. En el caso de los semiconductores y los aislantes el nivel de Fermi está entre ambas bandas de conducción, y únicamente se diferencian en la anchura de la brecha, llamada gap o banda prohibida. En los semiconductores tenemos un gap no demasiado grande, lo que permite que si se les da la suficiente energía puedan conducir la corriente eléctrica; mientras que en los aislantes, donde el gap es mucho mayor, es necesario un aporte energético superior que dificulta la conducción.

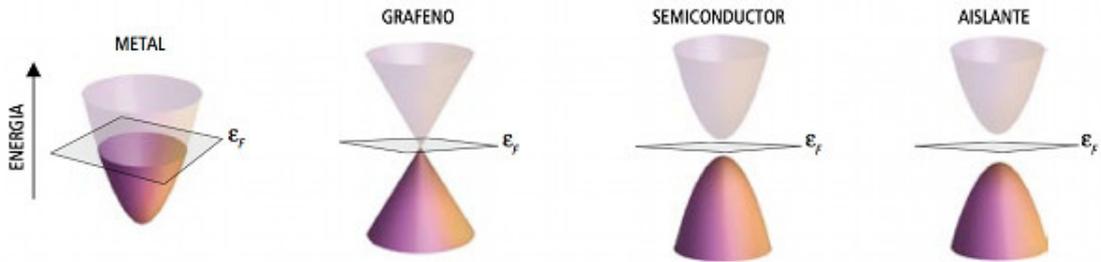


FIGURA 3.5: Bandas de energías. Metal, grafeno, semiconductores y aislante. Imagen tomada de [29].

3.3.2. Propiedades electrónicas

El grafeno, al igual que el grafito consiste en la hibridación sp^2 . Dado que tres de los electrones de carbono se usan para el amarre covalente σ en el plano de la red hexagonal (Fig. 3.6), el cual da la solidez a la estructura reticular, se tiene que el responsable de las propiedades electrónicas es el electrón débilmente ligado en el enlace π . (Fig. 3.7).

Mediante un hamiltoniano de enlace fuerte (tight binding) aplicado al electrón π , se

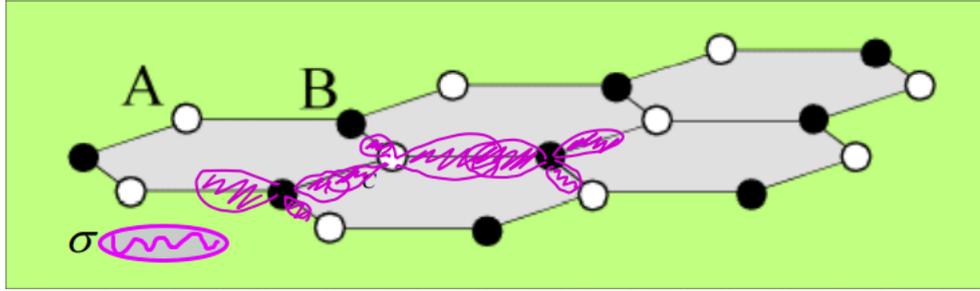


FIGURA 3.6: Los enlaces fuertes σ de la hibridación sp^2 determinan la estructura de la red hexagonal del grafeno (tipo panal de abeja) y le da solidez.

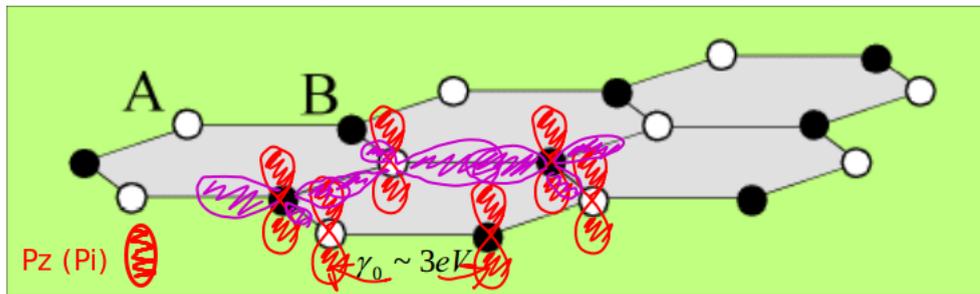


FIGURA 3.7: El enlace π determina las propiedades de transporte del grafeno.

llega a que la relación entre la energía (E) y vector momento \mathbf{K} es [14]:

$$E_{\pm}(\mathbf{K}) = \pm t \sqrt{3 + f(\mathbf{K})} - t' f(\mathbf{K}), \quad (3.5)$$

con $f(\mathbf{K}) = 2 \cos(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_1) + 2 \cos(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_2) + 2 \cos(\mathbf{K} \cdot (\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1))$.

El signo "+" en esta ecuación se refiere a la banda superior (o banda de conducción), conocida como la banda π y el signo "-" indica la banda inferior (o banda de valencia), conocida como la banda π^* ; de la estructura de banda del grafeno. El parámetro $t = \gamma_0 \approx 3 \text{ eV}$ [30] es la energía de salto al primer vecino y el parámetro t' es la energía de salto al segundo vecino. La figura 3.8 muestra la estructura de banda completa para el grafeno; en esta misma figura se puede ver que las bandas se tocan en los puntos de Dirac, exactamente a la energía de Fermi, que en este caso coincide con la energía cero. Notemos también que cuando t' es cero, el espectro es simétrico alrededor de la energía de Fermi, por esta razón se considera al grafeno como un semiconductor con banda prohibida de energía de tamaño cero, mientras que para un valor t' finito la situación cambia debido a la ruptura de esta simetría.

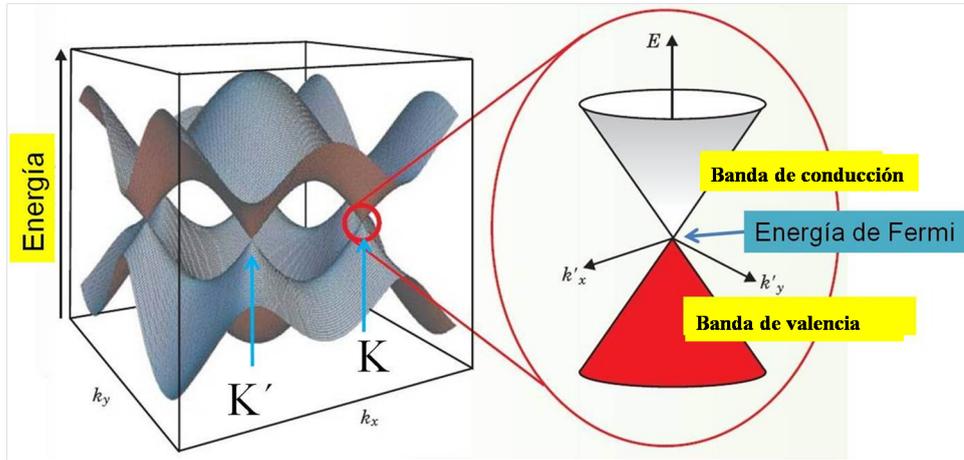


FIGURA 3.8: estructura de banda completa para el grafeno. Imagen tomada de [14].

Desarrollando en serie la Ec. 3.5, cerca de los puntos de Dirac como $\mathbf{q} = \mathbf{K} + \mathbf{k}$, con $|\mathbf{k}| \ll |\mathbf{K}|$, se tiene que [14]:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm v_F |\mathbf{k}| + \varepsilon (|\mathbf{k}| / |\mathbf{K}|)^2, \quad (3.6)$$

donde \mathbf{k} es el momento medido relativo a los puntos de Dirac y v_F representa la velocidad de Fermi, que está dada por $v_F = 3ta/2 = v_F \approx 1 \times 10^6 \text{ m/s}$. La velocidad de Fermi en estos puntos de Dirac es una constante que no depende de la energía o el momento, como es típico de los semiconductores con curvas parabólicas en su relación de dispersión. Este resultado fue obtenido por primera vez por Wallace en 1946.

Como las propiedades electrónicas dependen de los electrones con energía cercana a la energía de Fermi, se puede despreciar t' y basta solamente estudiar sus entornos. Allí el grafeno depara una sorpresa cuando k es muy pequeño. Por lo que, únicamente la aproximación a primer orden en k es importante. De esta manera, considerando tal aproximación, obtenemos una dispersión lineal en la energía, el cual es característica de la electrodinámica cuántica QED para fermiones de Dirac sin masa, excepto por el hecho de que, en el grafeno, los electrones ahora tienen una masa efectiva cero y se mueven con una velocidad v_F , que es 300 veces menos que la velocidad de la luz (c) en el vacío [1, 25]. Por lo tanto, muchas de las propiedades de la QED pueden aparecer en el grafeno, pero a velocidades más pequeñas. Una de estas propiedades que aparecen es el efecto Hall cuántico anómalo [23], el cual ha sido comprobado experimentalmente por diversos grupos [1, 31]. Esto es tal vez, la demostración más interesante de que los electrones en el grafeno se comportan como fermiones de Dirac sin masa. Además, los electrones pueden ser transmitidos con probabilidad 1 a través de una región prohibida [32], lo que se conoce como paradoja de Klein y que aparece también en la QED.

3.4. Método de obtención

El grafeno en estado libre fue obtenido por vez primera en la Universidad de Manchester, en 2004 por los científicos rusos A. K. Geim y K. Novoselov [24], mediante la técnica conocida exfoliación micromecánica o cinta pegante, consiste en la separación de la capa más externa de un sólido en laminillas. Por lo tanto, la exfoliación micromecánica utilizada para separar capas de grafeno se basa en tomar una muestra de grafito con cinta adhesiva; cabe mencionar que un milímetro de grafito consta en realidad de tres millones de capas de grafeno. Esta cinta adhesiva con muestra se pega y despega. En principio se obtienen muchas capas unidas de grafeno, pero cuando se repite el método de pegar y despegar unas 20 veces, se encuentran capas aisladas de grafeno del grosor de un sólo átomo de carbono (Fig. 3.9). Para corroborarlo, las muestras se fijan a una placa de silicio oxidado y se analiza mediante microscopía electrónica de tunelamiento, microscopía electrónica de barrido, microscopía de alta resolución y efecto túnel [33].

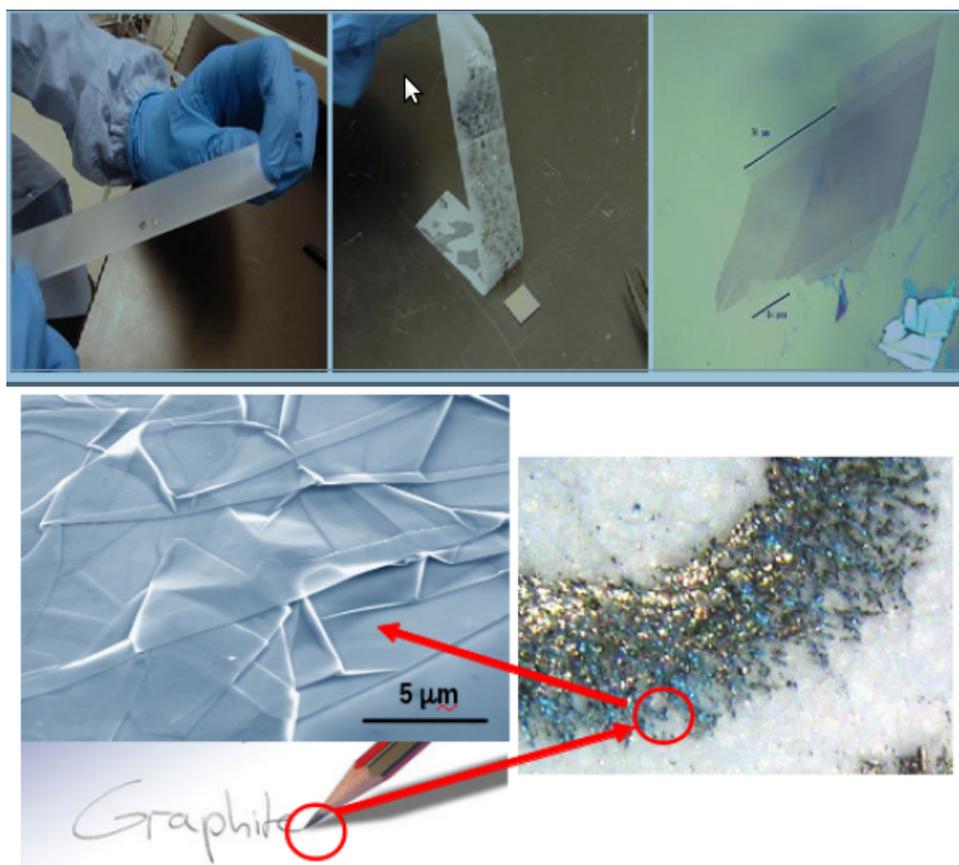


FIGURA 3.9: Exfoliación micromecánica, método para obtener grafeno.

3.5. Futuras aplicaciones

Las propiedades que exhibe el grafeno ha despertado el enorme interés de investigadores y empresarios por producirlo a escala industrial dadas sus potencias promisorias en aplicaciones tecnológicas. La investigación en este material se ha centrado en las futuras aplicaciones en nano-dispositivos [4–6]. Algunos artículos publicados han sido acerca de transistores, fotodetectores y sensores [7–9]. De todas las aplicaciones sugeridas de grafeno, el uso de grafeno como un electrodo delgado parece el más cercano a emerger. Ello se debe a las propiedades eléctricas (es un excelente conductor de la electricidad) y a las propiedades magníficas en la región de la luz visible, con una transparencia mayor al 90 % [3]. Los electrodos transparentes se requieren en una gran variedad de aplicaciones, tales como la pantalla táctil y pantallas de cristal líquido.

Capítulo 4

Ecuación de Dirac generalizada en grafeno curvo

Dado que los portadores de carga en el grafeno plano son descritos por fermiones de Dirac sin masa (ver apéndice A), es natural preguntarse si es posible modificar la ecuación de Dirac, teniendo en cuenta la interacción entre los fonones flexurales. Dos caminos se pueden seguir con el fin de responder a esta pregunta. Uno de ellos es el enfoque usual del enlace fuerte (tight binding) que utiliza el desarrollo de Taylor de la integral de traslape en el campo de desplazamientos [14, 15, 34]. Aquí se presenta un punto de vista alternativo, en el que se incluye la interacción entre los fonones flexurales, haciendo la observación de que una hoja de grafeno puede ser considerado, como un espacio curvo. La ecuación efectiva debe ser covariante; es decir, invariante bajo transformaciones de Lorentz. La ecuación deseada se puede considerar como la ecuación de Dirac en espacio-tiempo curvo, como en relatividad general. Además, dado que los modos de vibración son descritos por un potencial vectorial [14, 15, 34], nuestro enfoque permite describir todas las ramas de fonones y el potencial electromagnético, en una misma ecuación. Hay que tener en cuenta que el problema de la ecuación bidimensional de Dirac incluyendo un potencial vectorial electromagnético se ha resuelto recientemente [35, 36]. Como veremos al término de este capítulo, el enfoque actual tiene ciertas ventajas sobre el desarrollo de Taylor de los parámetros de enlace fuerte.

A continuación vamos a esbozar brevemente las ideas detrás del enfoque actual. Para grafeno a bajas temperaturas, su superficie puede ser considerada como plana (Fig. Izq. 4.1), por lo que la ecuación de Dirac no modificada es utilizada para describir la evolución de las cargas en la hoja de grafeno. Esta se escribe como sigue:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \hat{H}\Psi \quad \text{con} \quad \hat{H} = -i\hbar\nu_F[\gamma^x\nabla_x + \gamma^y\nabla_y], \quad (4.1)$$

donde ν_f es la velocidad de Fermi y

$$\gamma^x = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^y = \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

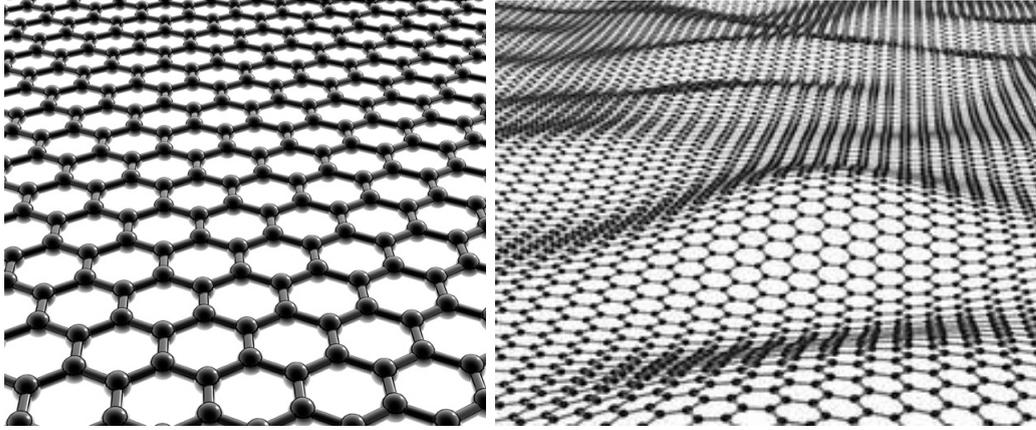


FIGURA 4.1: Grafeno plano (temperaturas bajas) y grafeno curvo ($T > 10K$).

Las matrices anteriores muestran en este momento que no hay ninguna diferencia entre los índices covariantes y contravariantes, debido a que:

$$\gamma^i \gamma^j + \gamma^j \gamma^i = \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2g_{ij} \mathbf{1}, \quad (i, j = x, y), \quad (4.2)$$

con $g_{ij} = \delta_{ij}$, por lo que, obviamente, la métrica contravariante elevando los índices es también $g^{ij} = \delta^{ij}$. Pero esto deja de ser cierto cuando el espacio bidimensional no es plano, sino ondulado (Fig. Der. 4.1), como es el caso para grafeno a $T \gg 10K$. Esta es la razón por el cual la ecuación de Dirac en dos dimensiones debe ser ahora generalizada con el fin de incorporar el hecho de que la métrica en la superficie de restricción no es más plana, sino curva. Afortunadamente, el problema de la formulación covariante de la ecuación de Dirac en un espacio curvo ha sido profundamente investigado desde hace mucho tiempo [37, 38], de manera que podemos seguir los mismos pasos en este caso concreto: introducir la métrica no euclidiana de dos dimensiones en la hoja de grafeno, y luego adaptar el álgebra de Clifford y encontrar la conexión de Christoffel, y montar todo esto en la versión covariante de la ecuación de Dirac:

$$\hat{H}\Psi \sim [\tilde{\gamma}^x \tilde{\nabla}_x + \tilde{\gamma}^y \tilde{\nabla}_y] \Psi. \quad (4.3)$$

Aquí no sólo la métrica contravariante se deforma, sino también las matrices- γ deben ser modificadas a fin de satisfacer las nuevas relaciones anticonmutativas con la métrica inducida, en lugar de la métrica plana. Además, $\tilde{\nabla}_j$ no sólo contiene la interacción electromagnética y el plano de fonones visualizado por el potencial vectorial, incluido de

manera usual en la invarianza de norma, sino también los símbolos de Christoffel de la métrica \tilde{g}_{ij} :

$$\begin{aligned}\tilde{\nabla}_j \Psi &= (\partial_j - eA_j) \Psi + \tilde{\Gamma}_{jk}^m \tilde{g}^{ki} \sum_{mi} \Psi \\ &= \hat{\pi}_j \Psi + \tilde{\Gamma}_{jk}^m \tilde{g}^{ki} \sum_{mi} \Psi,\end{aligned}\quad (4.4)$$

donde $\hat{\pi}_j = \partial_j - eA_j$ y los símbolos de Christoffel se definen como de costumbre, por medio de la métrica modificada:

$$\tilde{\Gamma}_{jk}^i = \frac{1}{2} \tilde{g}^{im} (\partial_j \tilde{g}_{mk} + \partial_k \tilde{g}_{jm} - \partial_m \tilde{g}_{jk}) \quad (4.5)$$

y \sum_{mk} es el valor matricial del tensor antisimétrico definido por medio de las matrices-gamas modificadas:

$$\sum_{mk} = \frac{1}{8} [\tilde{\gamma}_m \tilde{\gamma}_k - \tilde{\gamma}_k \tilde{\gamma}_m]. \quad (4.6)$$

Este término a menudo se llama "conexión espinorial" [37, 38].

Ahora, como se demuestra en el apéndice B, usando los términos hasta segundo orden en las potencias de la deformación $\partial_i f$, el resultado es como sigue:

$$\begin{aligned}\tilde{H} = \nu_F \left(\begin{array}{cc} 0 & \hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y \\ \hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y & 0 \end{array} \right) + \nu_F \left(\begin{array}{cc} (\partial_x f) \hat{\pi}_x + (\partial_y f) \hat{\pi}_y & 0 \\ 0 & -(\partial_x f) \pi_x - (\partial_y f) \hat{\pi}_y \end{array} \right) \\ - \nu_F (\vec{\nabla} f \cdot \vec{\sigma}) (\vec{\nabla} f \cdot \hat{\pi}) - i\hbar \nu_F \left[\frac{1}{8} \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} [(\partial_x f)^2 + (\partial_y f)^2] \right] - \frac{1}{4} [\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} f] \Delta f, \quad (4.7)\end{aligned}$$

donde $\vec{\nabla} = (\partial_x, \partial_y)$ y $\hat{\pi}_j = \partial_j - eA_j$ ($j = x, y$) es el momento generalizado.

Aquí podemos empezar a investigar las soluciones que describen el comportamiento de los portadores de carga en la hoja de grafeno deforme, interacturando con los fonones flexurales.

Para mostrar cómo se puede utilizar la Ec. 4.7, consideremos que el campo de desplazamientos puede ser escrito usando un conjunto simple de funciones base proporcionada por las ondas estacionarias [39]:

$$\vec{u} = \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_{\mu, \vec{q} > 0} \vec{e}_\mu(\vec{q}) [Q_{\mu, \vec{q}}^{(c)} \cos(\vec{q} \cdot \vec{R} - \omega_\mu(\vec{q})t) + Q_{\mu, \vec{q}}^{(s)} \sin(\vec{q} \cdot \vec{R} - \omega_\mu(\vec{q})t)], \quad (4.8)$$

donde $\vec{e}_\mu(\vec{q})$ es el vector de polarización para un vector de onda \vec{q} , μ es la rama fonónica, $\omega_\mu(\vec{q})$ la relación de dispersión y \vec{R} es la posición. La notación $q > 0$ indica que $q_x > 0$ y $q_y > 0$. $Q_{\mu, \vec{q}}^{(c)}$ y $Q_{\mu, \vec{q}}^{(s)}$ son los operadores dados en términos de los operadores

fonónicos de creación (aniquilación) [39] $a_{\mu, \vec{q}}(a_{\mu, \vec{q}}^\dagger)$:

$$Q_{\mu, \vec{q}}^{(\alpha)} = \frac{1}{\sqrt{2M\omega_\mu(\vec{q})}} \left(a_{\mu, \vec{q}}^{(\alpha)} + a_{\mu, \vec{q}}^{(\alpha)\dagger} \right), \quad (4.9)$$

donde α corre sobre c y s , y M es la masa del átomo de carbono. Por lo tanto, para fonones flexurales la función $f(x, y, t)$ está dada por:

$$f(x, y, t) = \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_{q>0} \left[Q_{F, \vec{q}}^{(c)} \cos\phi_q + Q_{\mu, \vec{q}}^{(s)} \sin\phi_q \right], \quad (4.10)$$

donde $\mu = F$ significa que estamos tratando con fonones flexurales, y la fase ϕ_q se define como $\phi_q = \vec{q} \cdot \vec{R} - \omega_\mu(\vec{q})t$. Para la rama flexural, $\omega_F(\vec{q}) = \alpha_F \|\vec{q}\|^2$ en donde $\alpha_F \approx 4,6 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$. $Q_{F, \vec{q}}^{(c)}$ y $Q_{\mu, \vec{q}}^{(s)}$ tienen unidades de longitud, por lo que $f(x, y, t)$ tiene las mismas unidades, mientras que $\partial_x f$ y $\partial_y f$ son adimensionales. A primer orden la ecuación de Dirac generalizada sólo necesita como entrada las derivadas parciales de $f(x, y, t)$:

$$\partial_x f = \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_{q>0} q_x \left[Q_{F, \vec{q}}^{(c)} \cos\phi_q + Q_{\mu, \vec{q}}^{(s)} \sin\phi_q \right] \quad (4.11)$$

$$\partial_y f = \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_{q>0} q_y \left[Q_{F, \vec{q}}^{(c)} \cos\phi_q + Q_{\mu, \vec{q}}^{(s)} \sin\phi_q \right] \quad (4.12)$$

Por ejemplo, si tenemos sólo la corrección lineal de la Ec. 4.7 y sustituimos las Ecs. 4.11 y 4.12, el hamiltoniano es el siguiente:

$$\hat{H} = \nu_F \begin{pmatrix} 0 & \hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y \\ \hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y & 0 \end{pmatrix} + \frac{2\nu_F}{\sqrt{N}} \sum_{q>0} \left[Q_{F, \vec{q}}^{(c)} \cos\phi_q + Q_{\mu, \vec{q}}^{(s)} \sin\phi_q \right] \times \begin{pmatrix} q_x \hat{\pi}_x + q_y \hat{\pi}_y & 0 \\ 0 & -q_x \hat{\pi}_x - q_y \hat{\pi}_y \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

Usando el hecho de que la velocidad de Fermi es mucho mayor que las velocidades de los modos flexurales, podemos despreciar la dependencia del tiempo y aplicar la teoría de perturbaciones para resolver la ecuación. Para entender la naturaleza de las soluciones, en la siguiente sección vamos a considerar el caso particular de una superficie con perfil geométrico tipo sinusoidal.

Capítulo 5

Soluciones aproximadas

Como se dijo en el capítulo anterior, aquí estudiaremos una de las superficies curvas más simple, dado por una forma geométrica sinusoidal:

$$f(x, y) = a \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}), \quad (5.1)$$

donde a es la amplitud de la deformación. Este corrugamiento ha sido experimentalmente observado en grafeno crecido sobre un sustrato de hierro (110) [40].

Al introducir la función deformación f en la ecuación de Dirac generalizada a primer orden (Ec. 4.13), se obtiene:

$$\begin{aligned} (\pi_x - i\pi_y)\psi_B + a \cos \Phi_q(q_x\pi_x + q_y\pi_y)\psi_A &= (i\hbar/\nu_F)\partial_t\psi_A, \\ (\pi_x + i\pi_y)\psi_A + a \cos \Phi_q(-q_x\pi_x - q_y\pi_y)\psi_B &= (i\hbar/\nu_F)\partial_t\psi_B. \end{aligned} \quad (5.2)$$

En el caso particular en que no hay dependencia del tiempo en $f(x, y; t)$, la evolución espacial y temporal puede ser separada. La parte temporal de la función de onda tiene la forma $\exp(-i\omega t)$, donde ω es una frecuencia. Por lo tanto, sólo nos quedamos con la parte espacial de la función deformación $a \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$. Eligiendo $\mathbf{q} = (q, 0)$, se obtiene:

$$\begin{aligned} (\partial_x - i\partial_y)\psi_B + a \cos(qx)q\partial_x\psi_A &= E\psi_A, \\ (\partial_x + i\partial_y)\psi_A - a \cos(qx)q\partial_x\psi_B &= E\psi_B, \end{aligned} \quad (5.3)$$

donde el parámetro E se define como $E \equiv i\hbar\omega/\hbar\nu_F \equiv i\epsilon/\hbar\nu_F$, donde ϵ es la energía, y ahora ψ_A y ψ_B denotan sólo la parte espacial de la función de onda. Con el fin de separar las variables, supongamos que la solución estacionaria es de la forma

$$\psi_A(x, y) = \mathcal{F}(y)\Phi_A(x), \quad \psi_B = \mathcal{F}(y)\Phi_B(x), \quad (5.4)$$

donde \mathcal{F} es una función regular en el origen. Entonces las Ecs. 5.3 toman la forma:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(y)\Phi'_B(x) - i\mathcal{F}'(y)\Phi_B(x) + aq\mathcal{F}(y)\cos(qx)\Phi'_A &= E\mathcal{F}(y)\Phi_A, \\ \mathcal{F}(y)\Phi'_A(x) + i\mathcal{F}'(y)\Phi_A(x) - aq\mathcal{F}(y)\cos(qx)\Phi'_B &= E\mathcal{F}(y)\Phi_B.\end{aligned}\quad (5.5)$$

Después de dividir por $\mathcal{F}(y)$, vemos que las variables se separan fácilmente si ponemos

$$\frac{\mathcal{F}'}{\mathcal{F}} = \text{Const},$$

lo que significa que $\mathcal{F}(y)$ es una función exponencial con exponente real o imaginario puro, dependiendo del signo de la constante. Elegimos el signo negativo con el fin de recuperar el caso de grafeno plano en el límite apropiado, lo que lleva al siguiente ansatz:

$$\psi_A(x, y) = e^{ik_y y}\Phi_A(x), \quad \psi_B^\pm(x, y) = e^{\pm ik_y y}\Phi_B^\pm(x). \quad (5.6)$$

La función ψ_B^\pm tiene dos signos, ya que, en principio, ψ_A y ψ_B son las componentes de un espinor, y tenemos que construir dos soluciones, una con la energía E y la otra con $-E$. Para el caso de grafeno plano, se sabe que uno puede pasar de una solución a otra, cambiando el signo de una componente, debido a la simetría de la red. Estas dos soluciones son necesarias para representar electrones y huecos. Aquí nos concentraremos en electrones, aunque la solución para los huecos se puede encontrar en una forma similar. Por esa razón, en lo que sigue vamos a buscar la solución para ψ_B^+ . La inserción del ansatz 5.6 en la Ec. 5.3 da como resultado:

$$\begin{aligned}[\partial_x - i(iK_y)]\Phi_B(x) + qa\cos(qx)\partial_x\Phi_A(x) &= E\Phi_A(x), \\ [\partial_x + i(iK_y)]\Phi_A(x) - qa\cos(qx)\partial_x\Phi_B(x) &= E\Phi_B(x),\end{aligned}\quad (5.7)$$

lo que equivale a

$$[\partial_x + K_y]\Phi_B(x) + qa\cos(qx)\partial_x\Phi_A(x) = E\Phi_A(x), \quad (5.8)$$

$$[\partial_x - K_y]\Phi_B(x) + qa\cos(qx)\partial_x\Phi_A(x) = E\Phi_A(x). \quad (5.9)$$

Este sistema de ecuaciones es lineal, por lo que podemos obtener la solución general sumando soluciones parciales con K_y dado, es decir, utilizando el desarrollo de Fourier. Para tener una idea elemental de las propiedades de las soluciones, vamos a examinar en primer lugar el modo cero, que corresponde a una corriente incidente en la dirección x , dejando $K_y = 0$. Para otros modos de transporte (con $K_y \neq 0$) la diagonalización no es sencilla y sólo se puede lograr por aproximaciones sucesivas. En este trabajo sólo tomamos en cuenta el caso de $K_y = 0$, que es la más pertinente en relación con un experimento de conductividad típica. Por lo tanto, con el modo cero, la diagonalización

del sistema 5.9 es especialmente fácil, ya que toma la forma simplificada:

$$\begin{aligned} \partial\Phi_B(x) + qa \cos(qx)\partial_x\Phi_A(x) &= E\Phi_A(x), \\ \partial_x\Phi_A(x) - qa \cos(qx)\partial_x\Phi_B(x) &= E\Phi_B(x). \end{aligned} \quad (5.10)$$

Este sistema se diagonaliza por derivación de una de sus partes con respecto a x y sustitución posterior en la segunda ecuación. El resultado ordinario de la ecuación diferencial de segundo orden es común para ambas componentes Φ_A y Φ_B :

$$[1 + a^2q^2 \cos^2(qx)]\frac{d^2\Phi_A}{dx^2} - 2a^2q^3 \sin(qx) \cos(qx)\frac{d\Phi_A}{dx} = E[E - aq^2 \sin(qx)]\Phi_A \quad (5.11)$$

o, en una forma más estándar,

$$\frac{d^2\Phi_A}{dx^2} - \frac{a^2q^3 \sin(2qx)}{[1 + a^2q^2 \cos^2(qx)]} \frac{d\Phi_A}{dx} - \frac{E[E - aq^2 \sin(qx)]}{[1 + a^2q^2 \cos^2(qx)]} \Phi_A = 0 \quad (5.12)$$

y la misma ecuación para Φ_B , pero con el signo $+$ en el tercer término. A continuación introducimos un nuevo parámetro $\eta = aq^2$, que da lugar a una energía efectiva, el cual puede entenderse a partir de la relación

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} = \frac{q^2}{2m} \sim \eta, \quad (5.13)$$

donde ε es la energía y p es el momento. Este parámetro resultará ser de utilidad teniendo en cuenta diversos límites físicos de la energía, como se verá más adelante. Podemos ahora reescribir las dos ecuaciones como:

$$\frac{d^2\Phi_A}{dx^2} - \frac{aq\eta \sin(2qx)}{[1 + a\eta \cos^2(qx)]} \frac{d\Phi_A}{dx} - \frac{E[E - \eta \sin(qx)]}{[1 + a\eta \cos^2(qx)]} \Phi_A = 0 \quad (5.14)$$

$$\frac{d^2\Phi_B}{dx^2} - \frac{aq\eta \sin(2qx)}{[1 + a\eta \cos^2(qx)]} \frac{d\Phi_B}{dx} - \frac{E[E + \eta \sin(qx)]}{[1 + a\eta \cos^2(qx)]} \Phi_B = 0 \quad (5.15)$$

Ahora recordemos que en nuestra notación, el parámetro E se ha convertido en un imaginario puro:

$$E = i \frac{\hbar\omega}{\hbar\nu_F} \equiv i \frac{\epsilon}{\hbar\nu_F}, \quad (5.16)$$

donde ϵ es la desviación de energía del cono de Dirac (ϵ_D), es decir, la energía total de electrones es $\epsilon_{total} = \epsilon + \epsilon_D$. Estas observaciones son importantes a tener en cuenta para comprender la naturaleza de las soluciones en lo que sigue.

Notemos que la Ec. 5.12 es de la forma estándar

$$y'' + P(x)y' + Q(x)y = 0. \quad (5.17)$$

La solución

$$y(x) = Z(x)e^{-1/2 \int P(x)dx} \quad (5.18)$$

reduce la ecuación a una forma más simple:

$$Z'' + C(x)Z = 0, \quad (5.19)$$

donde

$$C(x) = Q(x) - \frac{1}{2}P'(x) - \frac{1}{4}P^2(x). \quad (5.20)$$

Con el fin de tener profundización respecto a las propiedades de las soluciones, vamos a tratar el caso de una deformación pequeña en el grafeno, es decir, una amplitud a pequeña de la superficie f . Tomando esta consideración se puede prescindir de las potencias de a superiores o iguales a dos ($a\eta \ll 1$).

Suponiendo que el parámetro E es del mismo orden que el parámetro $a\eta$ (ya que cerca del cono de Dirac $\epsilon \ll 1$), se obtiene la versión simplificada linealizada de nuestras ecuaciones:

$$\frac{d^2\Phi_A}{dx^2} - aq\eta \sin(2qx) \frac{d\Phi_A}{dx} - E(E - \eta \sin(qx))\Phi_A = 0. \quad (5.21)$$

Ahora tenemos

$$P(x) = -qa\eta \sin(2qx), \quad Q(x) = -E(E - \eta \sin(qx)) \quad (5.22)$$

y

$$\int P(x)dx = -qa\eta \int \sin(2qx)dx = \frac{a\eta}{2} \cos(2qx) \quad (5.23)$$

de modo que

$$\Phi_A(x) = Z(x)e^{-a\eta/4 \cos(2qx)}. \quad (5.24)$$

La función $Z(x)$ satisface la siguiente ecuación diferencial lineal ordinaria:

$$Z'' + \left[E\eta \sin(qx) - E^2 - \eta^2 \cos(2qx) - \frac{a\eta^3}{4} \sin^2(2qx) \right] Z = 0. \quad (5.25)$$

y la inserción de la expresión 5.16, se obtiene

$$Z'' + \left[\left(\frac{\epsilon}{\hbar\nu_F} \right)^2 + \frac{i\epsilon}{\hbar\nu_F} \eta \sin(qx) - \eta^2 \cos(2qx) - \frac{a\eta^3}{4} \sin(2qx) \right] Z = 0. \quad (5.26)$$

Fácilmente se comprueba que en el límite de la geometría plana, cuando no hay deformación ($a = 0$), la ecuación para Z es:

$$Z'' + \left(\frac{\epsilon}{\hbar\nu_F} \right)^2 Z = 0. \quad (5.27)$$

La solución de la ecuación anterior representa una onda monocromática que se propaga en la dirección x ,

$$\Phi_A = e^{i(\omega t - (\epsilon/\hbar\nu_F)x)} = e^{i(\omega t - K_x x)}, \quad (5.28)$$

es decir, es la solución del problema de las partículas libres (como era de suponerse) y donde se ha puesto

$$K_x = \frac{\epsilon}{\hbar\nu_F}, \quad (5.29)$$

el cual tiene dimensión, cm^{-1} .

Despreciando ahora el término cúbico η^3 , podemos escribir la siguiente ecuación aproximada para $Z(x)$:

$$Z'' + [K_x^2 + iK_x\eta \sin(qx) - \eta^2 \cos(2qx)] Z = 0 \quad (5.30)$$

Dos límites que son de especial interés pueden ser tratados por separado y dar lugar a conocidas ecuaciones:

I) Cuando $K_x \ll \eta$, correspondiente a los electrones entre la energía de Dirac y la energía eficaz $a\eta$ (vale la pena recordar que cerca del punto de Dirac, K_x es casi cero, ya que mide la desviación del impulso \mathbf{K}_D en cada cono de Dirac [14], con lo que el impulso completo es $\hbar\mathbf{K}_{Total} \equiv \hbar(\mathbf{K}_D + \mathbf{K})$). Entonces la Ec. 5.30 se reduce a

$$Z'' - \eta^2 \cos(2qx)Z = 0 \quad (5.31)$$

que es inestable por naturaleza, debido a que no hay término constante respecto de la frecuencia fundamental en la ecuación de Mathieu: aquí el término oscilante cambia de signo y la solución de Z no se puede mantener acotada. Esto significa que los electrones cuya energía es demasiado baja ($K_x \ll \eta$) no son capaces de propagarse en la hoja de grafeno. Notemos también que la inclusión del término lineal η conduce básicamente al mismo tipo de solución no acotada.

II) Cuando $K_x \gg \eta$, que corresponde a energías altas (más de la energía de Fermi, $K_x \gg K_F$), la ecuación para Z se convierte en

$$Z'' + K_x^2 \left[1 + i \frac{\eta}{K_x} \sin(qx) \right] Z = 0 \quad (5.32)$$

Esta ecuación tiene la forma de una ecuación de Mathieu con un parámetro complejo, que aparece por ejemplo en el problema de corrientes de Foucault en un solenoide elíptico [41]. Definiendo una nueva variable de tal manera que

$$qx = 2\tilde{x} + (\pi/2). \quad (5.33)$$

La Ec. 5.32 puede reescribirse como

$$Z'' + [A + i2s \cos(2q\tilde{x})] Z = 0 \quad (5.34)$$

donde los parámetros A y s son tal que:

$$A = \frac{4K_x^2}{q^2}, \quad s = \frac{2K_x\eta}{q^2}, \quad (5.35)$$

es decir, hay una condición suplementaria en la ecuación de Mathieu, ya que $A(s) = (q/\eta)^2 s^2$. Las soluciones de la Ec. 5.34 están dadas por las funciones complejas de Mathieu [41] $cer(\tilde{x}, -is)$, $cei(\tilde{x}, -is)$, $ser(\tilde{x}, -is)$, y $sei(\tilde{x}, -is)$. Por lo tanto, la solución puede escribirse como una superposición de soluciones con coeficientes C_j y D_j ,

$$Z(\tilde{x}) = \sum_j [C_j ce_j(\tilde{x}, -is) + D_j se_j(\tilde{x}, -is)],$$

donde, por ejemplo [41],

$$ce_{2n}(\tilde{x}, -is) = cer_{2n}(\tilde{x}, -is) + icei_{2n}(\tilde{x}, -is) = \sum_{r=0}^{\infty} A_{2r}^{(2n)} \cos(2r\tilde{x}, -is) \quad (5.36)$$

y $A_{2r}^{(2n)}$ es un coeficiente complejo, con una relación de recurrencia definida a partir de una variable auxiliar V_{2r} ,

$$V_{2r} = \frac{A_{2r+2}^{(2n)}}{A_{2r}^{(2n)}} \quad (5.37)$$

de tal manera que

$$(4r^2 - A_0)V_{2r-2} + s(V_{2r}V_{2r-2} + 1) = 0. \quad (5.38)$$

Las soluciones $ce_{2n+1}(x)$ tienen una naturaleza similar. Un segundo conjunto de soluciones son obtenidos de la forma [41]

$$se_{2n}(\tilde{x}, -is) = ser_{2n}(\tilde{x}, -is) + ise_{2n}(\tilde{x}, -is) = \sum_{r=0}^{\infty} B_{2r}^{(2n)} \sin(2r\tilde{x}, -is) \quad (5.39)$$

Las soluciones resultantes muestran el fenómeno de resonancias paramétricas. El patrón de resonancia es la misma que en el caso de grafeno bajo radiación electromagnética [36]. Cabe mencionar que la resonancia paramétrica es un fenómeno que tiene que ver con las vibraciones debido a excitaciones externas, en donde uno o más parámetros que lo definen son variables en el tiempo. Cuando la excitación es aproximadamente dos veces la frecuencia natural de vibración, la oscilaciones tienden a incrementar y por consiguiente a producir inestabilidad en el sistema. Entonces, para el caso del grafeno, las excitaciones de los átomos de carbono, debido al incremento de la temperatura o por medio de las deformaciones transversales, podrían ser los responsables de grandes respuestas en el sistema. Esto es de suma importancia en el área de ingeniería mecánica, ya que conociendo los requerimientos de un dispositivo, se pueden establecer consideraciones de diseño en base a las excitaciones paramétricas. Por otro lado, por medio de la relación de recurrencia 5.38, pueden aparecer regiones de energías prohibidas [36] que podría permitirnos controlar y modificar el flujo de los electrones, y ser útil para construir compuertas electrónicas. Esto es de gran importancia para la fabricación de nuevos transistores a base de grafeno.

Capítulo 6

Conclusión

Se dio una breve descripción del átomo de carbono y como a partir de este elemento surgen las diferentes estructuras cristalinas: el grafito, el diamante, los fullerenos, los nanotubos de carbono y el grafeno. Esta última estructura es fuente de motivación de muchos artículos de investigación y por si fuera poco del premio Nobel de Física 2010; debido a sus sorprendentes propiedades eléctricas, térmicas, mecánicas y ópticas. Tiene además una característica peculiar de la QED, los portadores de carga en el grafeno a baja energía, obedecen la ecuación de Dirac; es decir, los electrones se mueven a través de él como si no tuvieran masa (como los fotones), con una movilidad electrónica 100 veces mayor que la del silicio y trescientas veces menor que la velocidad de la luz [1, 25]. Sin embargo, hay ciertas discrepancias en los valores de la movilidad electrónica, dependiendo de que si las muestras de grafeno son suspendidas o están en un sustrato [10, 11]. Por encima $T > 10K$ se cree que tales discrepancias son una consecuencia del papel fundamental de las vibraciones de la superficie del grafeno (conocido como fonones flexurales [14]); causado por la dispersión de electrones. Por otro lado, el grafeno puede ser curvado mediante la aplicación de tensión y modificar también las propiedades electrónicas. Entonces, con el fin de describir los portadores de carga moviéndose en grafeno curvo, tomando en consideración además a los fonones flexurales; se ha obtenido una ecuación de Dirac generalizada. Para derivar dicha ecuación, se obtuvo primero una métrica apropiada y después se aplicó el principio de covarianza. La ecuación resultante contiene una corrección lineal, además de varios términos no lineales. Algunos de estos términos no lineales corresponden al desarrollo de Taylor del enfoque integral de traslape [14], mientras que otros, incluyendo la corrección lineal, son nuevos. Tales términos pueden dar lugar a efectos interesantes, como las resonancias entre los modos de fonones diferentes, los fonones debido a la flexión y el campo electromagnético externo. Esperamos que estos términos no lineales son importantes a temperaturas más altas. En contraste, tomando el caso particular, donde el grafeno es modelado por medio de una

forma tipo sinusoidal, se obtuvo un umbral para la propagación de electrones. Para los electrones por encima de este umbral, las ecuaciones correspondientes son sólo un conjunto de ecuaciones acopladas tipo Mathieu, lo que indica la posibilidad de resonancias paramétricas. Tales resonancias paramétricas podrían dar lugar a grandes respuestas en el sistema. Esto es muy importante para establecer consideraciones de diseño de un dispositivo. No obstante, a partir de la relación de recurrencia, que surge de las ecuaciones de Mathieu, pueden aparecer regiones de energías prohibidas [36]. El que exista regiones de energías prohibidas (GAP), podría permitirnos controlar y modificar el flujo de los electrones, y ser útil para construir compuertas electrónicas y diseñar transistores de grafeno. Esto es de gran importancia para las nuevas aplicaciones tecnológicas que se están llevando a cabo hoy en día. Cabe mencionar por último, que los resultados obtenidos se publicaron en la revista *Physica B: Condensed Matter* (ver Ref. [42]).

Apéndice A

Ecuación de Dirac

Teniendo en mente el objetivo de resolver la ecuación de Dirac en un espacio plano, primero se realizará un análisis de dicha ecuación en 3+1 dimensiones. Posteriormente estos resultados serán trasladados al caso de 2+1 dimensiones y se comparará con la ecuación de amarre fuerte para el grafeno en los puntos de Dirac.

A.1. Ecuación de Dirac en 3+1 dimensiones

En 1927 Paul A. Dirac intentó postular una nueva ecuación para el movimiento de los electrones, que generalizara la ecuación de Schrödinger, de modo tal que resultara compatible con la Relatividad Especial de Einstein (la Schrödinger no era). Así que, para conciliar de manera consistente los postulados de la Relatividad con la interpretación probabilística de la teoría de Schrödinger de la Mecánica Cuántica, Dirac optó por obtener de la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi, \quad (\text{A.1})$$

una ecuación invariante de Lorentz, que al ser lineal en la derivada temporal también debía ser lineal en las derivadas espaciales, y escribió la ecuación:

$$H\Psi = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p}\Psi + \beta mc^2\Psi = \left(\sum_{i=1}^n c\alpha_i p^i\right)\Psi + \beta mc^2\Psi, \quad (\text{A.2})$$

donde c es la velocidad de la luz en el vacío, m la masa de la partícula, \vec{p} el momento y α y β coeficientes a determinar.

En esta ecuación al imponer que se verifique la relación relativista

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4, \quad (\text{A.3})$$

se tiene que

$$H^2 = c^2 \sum_{i,k}^3 \frac{1}{2} (\alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i) p^i p^k + m c^3 \sum_{i=1}^3 (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) p^i + \beta^2 m^2 c^4, \quad (\text{A.4})$$

donde $\alpha_i \alpha_k p^i p^k = \frac{1}{2} (\alpha_i \alpha_k p^i p^k + \alpha_k \alpha_i p^k p^i) = \frac{1}{2} (\alpha_i \alpha_k p^i p^k + \alpha_k \alpha_i p^i p^k)$, pues i y k son índices mudos y p^i y p^k conmutan. Por tanto se deben verificar las condiciones,

$$\alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i = 2\delta_{ik} \quad (\text{A.5})$$

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 \quad (\text{A.6})$$

$$\alpha_i^2 = \beta^2 = 1 \quad (\text{A.7})$$

Para cumplir estas condiciones los coeficientes α_i y β deben ser matrices. Como condición adicional, las matrices deben ser hermitianas, para que el Hamiltoniano también lo sea. Ahora bien, usando el hecho de que $\alpha_i = \beta^2 = 1$, obtenemos que los eigenvalores de estas matrices son ± 1 . Además, tenemos que la traza de estas matrices es cero, esto se debe a la Ec. A.6, donde se encuentra que

$$\alpha_i = -\beta \alpha_i \beta \quad (\text{A.8})$$

Por las propiedades cíclicas de la traza se puede escribir

$$\text{Tr} \alpha_i = -\text{Tr} \beta \alpha_i \beta = -\text{Tr} \beta^2 \alpha_i = 0. \quad (\text{A.9})$$

Ya que la traza es la suma de los eigenvalores, el número de eigenvalores positivos y negativos debe de ser igual, y como consecuencia α_i y β tienen que ser matrices con dimensión par. La mínima dimensión en que se cumple la relación $\alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i = 2\delta_{ik}$ es 2 y la cumplen las matrices de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad y \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.10})$$

Sin embargo no existe ninguna matriz que cumpla $\beta^2 = 1$ y $\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0$. Para cumplir estas dos condiciones es necesario ir a dimensión 4 y una representación particular de estas matrices es

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.11})$$

donde las σ_j son las matrices de Pauli y las entradas con el símbolo 1 en la matriz β representa matrices unitarias de 2x2.

Así la nueva ecuación tiene 4 componentes y resulta

$$(c\vec{\alpha} \cdot \hat{p} + \beta mc^2)\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (\text{A.12})$$

donde el Hamiltoniano es

$$H = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2. \quad (\text{A.13})$$

El operador momento y la función de onda vienen dados por

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \quad y \quad \Psi(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{r}, t) \\ \Psi_2(\vec{r}, t) \\ \Psi_3(\vec{r}, t) \\ \Psi_4(\vec{r}, t) \end{pmatrix} \quad (\text{A.14})$$

A.1.1. Forma covariante de la Ecuación de Dirac en 3+1 dimensiones

Cabe señalar que la Ec. A.12 se puede escribir en forma covariante, es decir, si multiplicamos por β a la izquierda de esta ecuación obtenemos:

$$(c\beta\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + mc^2)\Psi = i\hbar\beta \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (\text{A.15})$$

que puede reescribirse de la siguiente manera

$$(c\gamma^\mu p_\mu - mc^2)\Psi = 0, \quad (\text{A.16})$$

$$(i\hbar c\gamma^\mu \partial_\mu - mc^2)\Psi = 0, \quad (\text{A.17})$$

donde se han introducido las matrices de Dirac

$$\gamma = (\beta, \beta\alpha). \quad (\text{A.18})$$

Las Ecs. A.16 y A.17 son llamadas comunmente como la ecuación de Dirac en su forma covariante.

A continuación vamos a resolver la ecuación de Dirac para un partícula que se mueve en un espacio plano.

A.1.2. Partícula en movimiento

Para describir a una partícula en movimiento, se propone una solución del tipo:

$$\Psi(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{x} \cdot \vec{p})} \psi(p). \quad (\text{A.19})$$

Introduciendo esta solución en la Ec. A.16, obtenemos

$$(c\gamma^\mu p_\mu - mc^2)\psi(p) = 0. \quad (\text{A.20})$$

Esta es la ecuación de Dirac en el espacio de momentos y

$$\psi(p) = \begin{pmatrix} \phi(p) \\ \chi(p) \end{pmatrix}$$

se llama espinor de Dirac.

Sustituyendo $\gamma^\mu p_\mu = \gamma^0 p_0 - \vec{\gamma} \cdot \vec{p}$ en la Ec. A.20, llegamos a la siguiente expresión:

$$\begin{pmatrix} E - m^2 & -c\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ c\vec{\sigma} \cdot \vec{p} & -E - m^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi(p) \\ \chi(p) \end{pmatrix} = 0, \quad (\text{A.21})$$

con

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{p} = \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix} \quad (\text{A.22})$$

Este sistema posee 4 soluciones linealmente independientes:

$$\psi_1(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_z}{E+mc^2} \\ \frac{x+ip_y}{E+mc^2} \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x} = u_1(p) e^{-ip \cdot x}, \quad (\text{A.23})$$

$$\psi_2(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{p_x - ip_y}{E+mc^2} \\ \frac{-p_z}{E+mc^2} \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x} = u_2(p) e^{-ip \cdot x}, \quad (\text{A.24})$$

$$\psi_3(x) = \begin{pmatrix} \frac{-p_z}{E-mc^2} \\ \frac{p_x+ip_y}{E-mc^2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x} = u_3(p) e^{-ip \cdot x}, \quad (\text{A.25})$$

$$\psi_4(x) = \begin{pmatrix} \frac{p_x-ip_y}{E-mc^2} \\ \frac{-p_z}{E-mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x} = u_4(p) e^{-ip \cdot x}, \quad (\text{A.26})$$

Interpretamos estas soluciones de tal manera que u_1 y u_2 corresponden al fermión (por ejemplo el electrón), mientras que u_3 y u_4 corresponden al anti-fermión (por ejemplo el positrón). Las dos soluciones para cada caso representan a las dos direcciones de espín que puede tener la partícula.

A.2. Ecuación de Dirac en 2+1 dimensiones

Para obtener la ecuación de Dirac en 2+1 dimensiones, se debe eliminar la tercera componente espacial de la Ec. A.22 en 3+1 dimensiones; por lo que, sólo basta tomar ciertas matrices de 2x2 para satisfacer las condiciones A.5, A.6 y A.7. Estas matrices se pueden construir a partir de las matrices de Pauli, lo que da como resultado a que existan dos representaciones de las matrices γ^μ . Podemos escogerlas de la siguiente manera:

$$\gamma^0 = \sigma_3, \quad \gamma^1 = i\sigma_1, \quad \gamma^2 = i\sigma_2 \quad (\text{A.27})$$

o

$$\gamma^0 = \sigma_3, \quad \gamma^1 = i\sigma_1, \quad \gamma^2 = -i\sigma_2. \quad (\text{A.28})$$

Partiendo de la representación A.28 y las Ecs. A.21 y A.22, y proponiendo una solución de la forma A.19, obtenemos en el espacio momentos

$$\left[\begin{pmatrix} E - m^2 & 0 \\ 0 & -E - m^2 \end{pmatrix} - c \begin{pmatrix} 0 & ip_x - p_y \\ ip_x + p_y & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = 0, \quad (\text{A.29})$$

Este sistema posee dos soluciones linealmente independientes:

$$\psi_1(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{-p_y - ip_x}{E+mc^2} \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x} = u_1(p) e^{-ip \cdot x}, \quad (\text{A.30})$$

$$\psi_2(x) = \begin{pmatrix} \frac{-p_y + ip_x}{E - mc^2} \\ 1 \end{pmatrix} e^{-ip \cdot x} = u_2(p) e^{-ip \cdot x}. \quad (\text{A.31})$$

La primera solución u_1 corresponde al fermión y la segunda solución u_2 al anti-fermión.

A.3. Ecuación de Dirac en grafeno plano

Se sabe que las propiedades de transporte del grafeno, se centran entorno a los puntos \mathbf{K} y \mathbf{K}' , llamados puntos de Dirac [14]. A partir de un estudio alrededor de ellos, se puede obtener la relación de dispersión, es decir, las bandas de energía; el cual son indispensables para saber si se trata de un metal o un semiconductor. Es preciso enfatizar que estos resultados surgen de resolver la ecuación de Schrödinger con la aproximación de amarre fuerte (tight binding) [43].

El modelo de amarre fuerte para el grafeno con interacciones a primeros vecinos, da una ecuación de Schrödinger de la forma [43]:

$$H\Psi(\mathbf{K}) = E(\mathbf{K})\Psi(\mathbf{K}) \quad y \quad \Psi(\mathbf{K}) = \begin{pmatrix} \phi(\mathbf{K}) \\ \chi(\mathbf{K}) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.32})$$

donde el hamiltoniano es

$$H = \begin{pmatrix} 0 & -\alpha t \\ -\alpha * t & 0 \end{pmatrix} \quad con \quad \alpha(\mathbf{K}) = 1 + e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_2}. \quad (\text{A.33})$$

La ecuación anterior puede reescribirse de la forma:

$$\begin{pmatrix} E(\mathbf{K}) & -\alpha t \\ -\alpha * t & E(\mathbf{K}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi(\mathbf{K}) \\ \chi(\mathbf{K}) \end{pmatrix} = 0. \quad (\text{A.34})$$

Lo anterior se vuelve un problema de eigenvalores, asimismo la relación de dispersión es obtenida en la forma estándar, haciendo el determinante cero. Por lo tanto, se tiene que la relación de dispersión es:

$$E(\mathbf{K}) = \pm t |\alpha(\mathbf{K})| \quad (\text{A.35})$$

Calculando la magnitud de α y usando las componentes (x, y) para \mathbf{K} , obtenemos [43]:

$$E(K_x, K_y) = \pm t \sqrt{1 + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}K_y\right)\cos\left(\frac{a}{2}K_x\right) + 4\cos^2\left(\frac{a}{2}K_x\right)}, \quad (\text{A.36})$$

donde $a = \sqrt{3}a_0$ es la constante de la red y $a_0 \approx 1,42\text{\AA}$ la distancia carbono-carbono en el grafeno.

Resulta interesante hacer un análisis más detallado de lo que sucede alrededor de los puntos de Dirac. Esto se puede hacer a partir de un desarrollo de Taylor, por ejemplo, del punto \mathbf{K} . La función que vamos a desarrollar en serie en nuestro caso es $\alpha(\mathbf{K})$, el cual puede reescribirse como:

$$\alpha(K_x, K_y) = 1 + 2e^{i\frac{\sqrt{3}a}{2}K_x} \cos\left(\frac{a}{2}K_y\right). \quad (\text{A.37})$$

En nuestro caso se toma las coordenadas del punto:

$$\mathbf{K} = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{3a}\right). \quad (\text{A.38})$$

Tenemos que la expansión en serie requerida alrededor de $\mathbf{K} + \mathbf{k}$ es:

$$\begin{aligned} \alpha(\mathbf{K} + \mathbf{k}) &= \left[-i\sqrt{3}ae^{i\pi} \cos\left(\frac{\pi}{3}\right), ae^{i\pi} \sin\left(\frac{\pi}{3}\right) \right] \cdot (k_x, k_y) \\ &= \frac{\sqrt{3}a}{2}(ik_x - k_y) \end{aligned} \quad (\text{A.39})$$

Si se toman nuevos ejes, de tal manera que el eje y se transforme en el eje x' y el eje x sea el eje y' , el hamiltoniano de la Ec. A.33 finalmente toma la forma:

$$H = \frac{\sqrt{3}at}{2} \begin{pmatrix} 0 & \hbar(k_{x'} - ik_{y'}) \\ \hbar(k_{x'} + ik_{y'}) & 0 \end{pmatrix} \equiv v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{p}, \quad (\text{A.40})$$

donde $v_F = \sqrt{3}at/2 \approx 1 \times 10^6 \text{ m/s}$ es la velocidad de Fermi.

Notemos que el hamiltoniano de Dirac está dado por

$$H_D = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2. \quad (\text{A.41})$$

Si tomamos $m = 0$ y la representación de la ecuación de Dirac en 2+1 dimensiones, se tiene que:

$$H_D = \vec{\sigma} \cdot \vec{p} = c \begin{pmatrix} 0 & (p_{x'} - ip_{y'}) \\ (p_{x'} + ip_{y'}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.42})$$

Se observa que la Ec. A.42 y la Ec. A.40 son equivalentes salvo que, para el grafeno la velocidad de los portadores de carga es la velocidad de Fermi v_F y que es 300 veces menor que la velocidad de la luz c . Por lo tanto, se puede estudiar al grafeno con la ecuación de Dirac ultrarelativista (como los fotones). Para el caso del grafeno los portadores de carga son llamados fermiones de Dirac sin masa.

Apéndice B

Ecuación covariante de Dirac en espacios curvos

En esta sección comenzamos la búsqueda de las métricas resultantes y sus conexiones de Christoffel en grafeno corrugado. La superficie materializada por la hoja de grafeno puede ser descrito, por

$$z = f(x, y, t) \quad (\text{B.1})$$

donde x, y son las coordenadas en la hoja de grafeno, y z es el plano de desplazamiento. Nótese que aquí sólo tenemos en cuenta la rama de fonones flexurales, ya que los fonones planos pueden ser descrito por la inclusión de un potencial vectorial [14], cuya solución es conocida [35, 36].

Como ahora la diferencial dz se convierte en una combinacin lineal de dx y dy , tenemos

$$dz = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy \quad (\text{B.2})$$

Por otro lado la métrica inducida en la hoja viene dada por la siguiente fórmula:

$$ds^2 = g_{ij} dx^i dx^j, \quad (i, j = x, y, z), \quad (\text{B.3})$$

donde g_{ij} es el tensor métrico. O bien, en una forma más explícita,

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy \right)^2, \quad (\text{B.4})$$

lo cual es una métrica en un espacio curvo de dos dimensiones, parametrizado por dos variables espaciales (x, y) . Utilizando la última expresión se obtiene la forma explícita

de la métrica inducida, que es

$$\tilde{g}_{jk} = \begin{pmatrix} 1 + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2 & \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial y} \\ \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial y} & 1 + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2 \end{pmatrix} \quad (\text{B.5})$$

Esto puede ser escrito como

$$\tilde{g}_{jk} = g_{jk} + h_{jk} \quad \text{con } j, k = x, y, \quad (\text{B.6})$$

donde $g_{ij} = \text{diag}(1, 1)$ es la métrica plana en un espacio bidimensional, y h_{ij} es la perturbación (se supone pequeña en comparación con 1) provocado por la ondulación de la hoja. La matriz B.5 es simétrica y real, por lo tanto puede ser diagonalizada por una transformación lineal apropiada. Así mismo la métrica inversa (contravariante) se puede encontrar fácilmente. Notemos que el determinante de la matriz correspondiente al tensor métrico covariante está como

$$\det \begin{pmatrix} 1 + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2 & \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial y} \\ \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial y} & 1 + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2 \end{pmatrix} = (1 + (\partial_x f)^2 + (\partial_y f)^2) \quad (\text{B.7})$$

Por lo tanto, la matriz inversa, correspondiente a la métrica contravariante g^{jk} es de la forma:

$$g^{jk} = \frac{1}{Q} \begin{pmatrix} 1 + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2 & \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial y} \\ \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial y} & 1 + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2 \end{pmatrix} \quad (\text{B.8})$$

donde hemos utilizado la notación abreviada para el determinante, $Q = (1 + (\partial_x f)^2 + (\partial_y f)^2)$. La deformación h_{jk} se compone enteramente de términos cuadráticos, el cual va como el producto de las derivadas parciales espaciales de la función deformación f ,

$$h_{jk} \simeq \partial_j f \partial_k f \quad (\text{B.9})$$

y es fácil comprobar que los símbolos de Christoffel correspondientes se reducen a

$$\tilde{\Gamma}_{jk}^i = \frac{1}{2} \tilde{g}^{im} (\partial_j \tilde{g}_{mk} + \partial_k \tilde{g}_{jm} - \partial_m \tilde{g}_{jk}) = \tilde{g}^{im} \partial_m f \partial_{jk}^2 f. \quad (\text{B.10})$$

Ambas cantidades desaparecen cuando $f = 0$, y se convierte de nuevo en la métrica plana. La ecuación de Dirac en dos dimensiones debe ser ahora generalizada con el fin de incorporar el hecho de que la métrica en la superficie de restricción no es más plana, sino curvo. Ahora vamos a obtener la generalización covariante de la ecuación de Dirac.

La ecuación que queremos producir puede ser escrita como la nueva deformación del hamiltoniano mecánico cuántico, actuando en un espinor Ψ de dos componentes de la siguiente manera:

$$\hat{H}\Psi \sim [\tilde{\gamma}^x \tilde{\nabla}_x + \tilde{\gamma}^y \tilde{\nabla}_y] \Psi \quad (\text{B.11})$$

Aquí no sólo la métrica contravariante se deforma, sino también las matrices γ deben ser modificados a fin de satisfacer las nuevas relaciones anticonmutativas con la métrica inducida, en lugar de la métrica plana; finalmente, $\tilde{\nabla}_j$ no sólo contiene la interacción electromagnética y el plano de fonones visualizado por el potencial vectorial, incluido de manera usual en la invarianza de norma, sino también los símbolos de Christoffel de la métrica \tilde{g}_{ij} :

$$\tilde{\nabla}_j \Psi = (\partial_j - eA_j)\Psi + \tilde{\Gamma}_{jk}^m \tilde{g}^{ki} \sum_{mi} \Psi, \quad (\text{B.12})$$

donde los símbolos de Christoffel se definen como de costumbre, por medio de la métrica modificada:

$$\tilde{\Gamma}_{jk}^j = \frac{1}{2} \tilde{g}^{im} [\partial_j \tilde{g}_{mk} + \partial_k \tilde{g}_{jm} - \partial_m \tilde{g}_{jk}] \quad (\text{B.13})$$

y $\tilde{\sum}_{mk}$ es el valor matricial del tensor antisimétrico definido por medio de las matrices-gamas modificadas:

$$\tilde{\sum}_{mk} = \frac{1}{8} [\tilde{\gamma}_m \tilde{\gamma}_k - \tilde{\gamma}_k \tilde{\gamma}_m]. \quad (\text{B.14})$$

Este término a menudo se llama "conexión espinorial" [37, 38].

Estamos buscando a dos generadores "deformado" del álgebra de Clifford $\tilde{\gamma}_x$ y $\tilde{\gamma}_y$, que satisfagan

$$\begin{aligned} \tilde{\gamma}_x \tilde{\gamma}_x &= \left(1 + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2\right) \mathbf{1}, & \tilde{\gamma}_y \tilde{\gamma}_y &= \left(1 + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2\right) \mathbf{1}, \\ \tilde{\gamma}_x \tilde{\gamma}_y + \tilde{\gamma}_y \tilde{\gamma}_x &= 2 \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial y} \mathbf{1}. \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Con el fin de hacer esto, hay que introducir la tercera matriz de Pauli, ya que la deformación de la lámina se sale fuera del plano bidimensional (x, y) . Por otro lado, el álgebra de Clifford sin deformar que satisface las relaciones anticonmutativas en una red plana en el espacio de tres dimensiones, se define como sigue:

$$\gamma_j \gamma_k + \gamma_k \gamma_j = 2g_{jk} \mathbf{1} \quad \text{con} \quad g_{jk} = \text{diag}(1, 1, 1), \quad j, k = 1, 2, 3, \quad (\text{B.16})$$

que pueden ser generados por tres matrices de Pauli como sigue:

$$\gamma_1 = \sigma_x, \quad \gamma_2 = \sigma_y, \quad \gamma_3 = \sigma_z \quad (\text{B.17})$$

con

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.18})$$

y además

$$(\gamma_x)^2 = \mathbf{1}, \quad (\gamma_y)^2 = \mathbf{1}, \quad (\gamma_z)^2 = \mathbf{1} \quad (\text{B.19})$$

El ansatz para las dos deformaciones en el espacio donde viven las matrices- γ es simple si ponemos

$$\tilde{\gamma}_x = \sigma_x + a\sigma_z, \quad \tilde{\gamma}_y = \sigma_y + b\sigma_z \quad (\text{B.20})$$

Entonces los coeficientes de a y de b deben ser, como es fácil de comprobar,

$$a = \frac{\partial f}{\partial x}, \quad b = \frac{\partial f}{\partial y} \quad (\text{B.21})$$

de modo que

$$\tilde{\gamma}_x = \sigma_x + \frac{\partial f}{\partial x}\sigma_z, \quad \tilde{\gamma}_y = \sigma_y + \frac{\partial f}{\partial y}\sigma_z. \quad (\text{B.22})$$

Ahora tenemos que producir sus contrapartes contravariantes que aparecen en la ecuación de Dirac (ver [ápndice A](#)). Tenemos

$$\tilde{\gamma}^x = \tilde{g}^{xx}\tilde{\gamma}_x + \tilde{g}^{xy}\tilde{\gamma}_y, \quad \tilde{\gamma}^y = \tilde{g}^{yx}\tilde{\gamma}_x + \tilde{g}^{yy}\tilde{\gamma}_y \quad (\text{B.23})$$

que da explícitamente

$$\begin{aligned} \tilde{\gamma}^x &= \frac{1}{Q} [(1 + (\partial_y f)^2)\sigma_x + (\partial_x f)\sigma_z - (\partial_x f)(\partial_y f)\sigma_y], \\ \tilde{\gamma}^y &= \frac{1}{Q} [(1 + (\partial_x f)^2)\sigma_y + (\partial_y f)\sigma_z - (\partial_x f)(\partial_y f)\sigma_x]. \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

Recordando que $Q = (1 + (\partial_x f)^2 + (\partial_y f)^2)$, podemos sumar y restar en los numeradores de la fórmula anterior, respectivamente, los siguientes términos: $(\partial_x f)^2\sigma_x$ en la primera, y $(\partial_y f)^2\sigma_y$ en la segunda; lo que nos permitirá separar las matrices no deformadas σ_x y σ_y , y los términos originales de la deformación que contienen derivadas espaciales de f . Esto da el siguiente resultado:

$$\hat{H} \sim \sigma^x \tilde{\nabla}_x + \sigma^y \tilde{\nabla}_y + \frac{\sigma_z}{Q} (\vec{g}rad f \cdot \vec{\nabla}) - \frac{1}{Q} (\vec{g}rad f \cdot \vec{\sigma}) (\vec{g}rad f \cdot \vec{\nabla}), \quad (\text{B.25})$$

donde los vectores y sus productos escalares son de dos dimensiones, es decir,

$$\vec{g}rad f = [\partial_x f, \partial_y f], \quad \vec{\sigma} = [\sigma_x, \sigma_y], \quad \vec{\nabla} = [\tilde{\nabla}_x, \tilde{\nabla}_y]$$

de modo que

$$\vec{g}rad f \cdot \vec{\sigma} = \partial_x f \sigma_x + \partial_y f \sigma_y, \text{ etc.} \quad (\text{B.26})$$

Vemos que ya en los numeradores tenemos no sólo términos lineales, sino también términos cuadráticos, a pesar de la presencia de términos cuadráticos en el denominador (contenida en el factor de normalización de Q). Si decidimos mantener sólo términos lineales, entonces el hamiltoniano modificado debería contener sólo un término adicional

proporcional a la matriz σ_z :

$$\hat{H}_{lin} \sim \hat{H}_0 + \delta\hat{H} = \sigma^x \nabla_x + \sigma^y \nabla_y + \sigma_z (\vec{grad} f \cdot \vec{\nabla}). \quad (\text{B.27})$$

Tenga en cuenta que también el operador diferencial se toma en su forma primaria, debido a que los coeficientes de la conexión sólo contienen expresiones cuadráticas en las derivadas de f . Observe que esta ecuación es similar a la obtenida en el desarrollo de Taylor en el enfoque de amarre fuerte. Sin embargo, si optamos por mantener a todos los términos de segundo grado, entonces debemos también tener en cuenta los coeficientes de Christoffel en $\tilde{\nabla}$. Es fácil comprobar la siguiente forma explícita de los símbolos de Christoffel; conservando sólo las expresiones de segundo orden significa que podemos utilizar la fórmula simplificada en la que \tilde{g}^{ij} se sustituye por $g^{ij} = \delta^{ij}$. Tenemos entonces

$$\begin{aligned} \Gamma_{xx}^x &= \partial_x f \partial_{xx}^2 f, & \Gamma_{xy}^x &= \Gamma_{yx}^x = \partial_x f \partial_{xy}^2 f, & \Gamma_{yy}^x &= \partial_x f \partial_{yy}^2 f, \\ \Gamma_{xx}^y &= \partial_y f \partial_{xx}^2 f, & \Gamma_{xy}^y &= \Gamma_{yx}^y = \partial_y f \partial_{xy}^2 f, & \Gamma_{yy}^y &= \partial_y f \partial_{yy}^2 f, \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

En derivadas covariantes, estos coeficientes se contraen con g^{jk} y las matrices antisimétricas \sum_{km} ,

$$\Gamma_{jk}^i g^{km} \sum_{im}.$$

Estamos utilizando las matrices no deformadas \sum_{jk} y no los deformados $\tilde{\sum}_{jk}$, porque vamos a mantener las expresiones hasta la segunda potencia de las derivadas de f , que ya están contenidos en los símbolos de Christoffel. Esto, teniendo en cuenta que sólo los términos diagonales en g^{ik} desaparecen y son iguales a uno, conduce al resultado siguiente. Para $j = x$ tenemos

$$\Gamma_{xx}^x g^{xx} \sum_{xx} + \Gamma_{xy}^x g^{yy} \sum_{xy} + \Gamma_{yx}^y g^{xx} \sum_{yx} + \Gamma_{yy}^y g^{yy} \sum_{yy}$$

y para $j = y$ se obtiene una expresión similar:

$$\Gamma_{yx}^x g^{xx} \sum_{xx} + \Gamma_{yy}^x g^{yy} \sum_{xy} + \Gamma_{yx}^y g^{xx} \sum_{yx} + \Gamma_{yy}^y g^{yy} \sum_{yy}$$

Los componentes del tensor métrico no se desvanecen y son iguales a uno, mientras que las matrices \sum son antisimétricas en sus dos índices más bajos, así que lo que queda es sólo

$$\Gamma_{xy}^x \sum_{xy} + \Gamma_{yx}^y \sum_{yx} = (\partial_x f \partial_{xy}^2 f - \partial_y f \partial_{xx}^2 f) \sum_{xy}$$

$$\Gamma_{yy}^x \sum_{xy} + \Gamma_{yx}^y \sum_{yx} = (\partial_y f \partial_{yx}^2 f - \partial_x f \partial_{yy}^2 f) \sum_{yx} \quad (\text{B.29})$$

Estos son los únicos términos restantes a ser incluidos en las derivadas covariantes. Estos se escriben como sigue:

$$\begin{aligned} \tilde{\nabla}_x &= (\partial_x - eA_x) + (\partial_x f \partial_{xy}^2 f - \partial_y f \partial_{xx}^2 f) \sum_{xy}, \\ \tilde{\nabla}_y &= (\partial_y - eA_y) + (\partial_y f \partial_{yx}^2 f - \partial_x f \partial_{yy}^2 f) \sum_{yx}. \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

En el hamiltoniano, ellos parecen multiplicarse por la izquierda por las correspondientes matrices $\tilde{\gamma}$, pero aquí, la evaluación de los términos procedentes de los coeficientes de la conexión de Christoffel, ya de segundo grado en la deformación f , se puede conservar sólo en su versión deformada, que en nuestro caso son las dos matrices de Pauli σ^x y σ^y , por lo que la parte del hamiltoniano deformado manteniendo la conexión de Christoffel es

$$\begin{aligned} \sigma^x \tilde{\nabla}_x + \sigma^y \tilde{\nabla}_y &= \sigma^x (\partial_x - eA_x) + \sigma^x (\partial_x f \partial_{xy}^2 f - \partial_y f \partial_{xx}^2 f) \sum_{xy} \\ &\quad + \sigma^y (\partial_y - eA_y) + \sigma^y (\partial_y f \partial_{yx}^2 f - \partial_x f \partial_{yy}^2 f) \sum_{yx} \end{aligned} \quad (\text{B.31})$$

Teniendo en cuenta el hecho de que

$$(\sigma_x)^2 = \mathbf{1}, \quad (\sigma_y)^2 = \mathbf{1}, \quad \sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x, \quad y \quad \sigma^x \sum_{xy} = \frac{1}{4} \sigma_y, \quad (\text{B.32})$$

sumando y restando $\partial_y f \partial_{yy}^2 f$ con la primera expresión y $\partial_x f \partial_{xx}^2 f$ con la segunda, obtenemos la siguiente forma invariante de los términos adicionales inducidos por la conexión de Christoffel:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{4} \sigma^y \int (\partial_x f \partial_{xy}^2 f + \partial_y f \partial_{yy}^2 f - \partial_y f \partial_{yy}^2 f - \partial_y f \partial_{xx}^2 f) \\ &+ \frac{1}{4} \sigma^x (\partial_y f \partial_{xy}^2 f + \partial_x f \partial_{xx}^2 f - \partial_x f \partial_{xx}^2 f - \partial_x f \partial_{yy}^2 f) \end{aligned} \quad (\text{B.33})$$

Esto a su vez puede ser escrita en una ecuación más compacta (y elegante) de la manera siguiente:

$$\frac{1}{8} \vec{\sigma} \cdot \overrightarrow{\text{grad}} [(\partial_x f)^2 + (\partial_y f)^2] - \frac{1}{4} [\vec{\sigma} \cdot \overrightarrow{\text{grad}} f] \Delta f \quad (\text{B.34})$$

con

$$\Delta f = \partial_{xx}^2 f + \partial_{yy}^2 f$$

Vale la pena señalar que la Ec. B.34 desaparece cuando f tiene una forma geométrica sinusoidal, pero es diferente de cero tan pronto como no exista una superposición de estas expresiones, por ejemplo, para una onda estacionaria. Ahora somos capaces de escribir el hamiltoniano total de un electrón en una hoja, teniendo en cuenta que

movimientos propios de la hoja descrita por la deformación del plano horizontal dada por $z = f(x, y, t)$, hasta segundo orden (términos de segundo grado en las derivadas de f):

$$\begin{aligned} \hat{H} \sim \hat{H}_0 + \frac{1}{Q} \sigma_z (\overrightarrow{grad} f) \cdot (\overrightarrow{\nabla}) - \frac{1}{Q} (\overrightarrow{grad} f \cdot \overrightarrow{\sigma}) (\overrightarrow{grad} f \cdot \overrightarrow{\nabla}) \\ + \frac{1}{8} \overrightarrow{\sigma} \cdot \overrightarrow{grad} [(\partial_x f)^2 + (\partial_y f)^2] - \frac{1}{4} [\overrightarrow{\sigma} \cdot \overrightarrow{grad} f] \Delta f. \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

El factor de normalización $1/Q$ en frente de las dos primeras contribuciones se puede ajustar a 1, ya que contiene los cuadrados de las derivadas de f , y si se desarrolla, va a crear condiciones de orden 3 y 4 cuando se multiplica por los términos que se encuentran a su derecha. El hamiltoniano de la mecánica cuántica se obtiene de esta expresión multiplicándolo por $-i$ y ν_F . Vamos a definir el operador de momento generalizado,

$$\hat{\Pi} = \hat{P} - e\vec{A} = -i\hbar \overrightarrow{grad} - e\vec{A},$$

donde \vec{A} es un potencial vectorial que describe un campo electromagnético [18] y [19] o planos de fonones longitudinales y transversales [17]. Entonces, si hacemos $\overrightarrow{grad} = \overrightarrow{\nabla}$, el hamiltoniano toma la forma:

$$\begin{aligned} \tilde{H} = \nu_F \begin{pmatrix} 0 & \hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y \\ \hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y & 0 \end{pmatrix} + \nu_F \begin{pmatrix} (\partial_x f)\hat{\pi}_x + (\partial_y f)\hat{\pi}_y & 0 \\ 0 & -(\partial_x f)\pi_x - (\partial_y f)\hat{\pi}_y \end{pmatrix} \\ - \nu_F (\overrightarrow{\nabla} f \cdot \overrightarrow{\sigma}) (\overrightarrow{\nabla} f \cdot \hat{\pi}) - i\hbar \nu_F \left[\frac{1}{8} \overrightarrow{\sigma} \cdot \overrightarrow{\nabla} [(\partial_x f)^2 + (\partial_y f)^2] \right] - \frac{1}{4} [\overrightarrow{\sigma} \cdot \overrightarrow{\nabla} f] \Delta f. \end{aligned} \quad (\text{B.36})$$

Esta última ecuación es la ecuación de Dirac generalizada. Es interesante observar que el hamiltoniano que aquí se deriva, la corrección a primer orden, los términos son similares a los obtenidos a partir de un enfoque de potencial vectorial [14]. Sin embargo, la Ec. B.36 contiene más términos.

Bibliografía

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov. Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. *Nature*, 438:197–200, 2005. URL <http://dx.doi.org/10.1038/nature04233>.
- [2] Alexander A. Balandin, Suchismita Ghosh, Wenzhong Bao, Irene Calizo, Desalegne Teweldebrhan, Feng Miao, and Chun Ning Lau. Superior thermal conductivity of single-layer graphene. *Nano Letters*, 8(3):902–907, 2008. URL <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/nl10731872>.
- [3] R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres, and A. K. Geim. Fine structure constant defines visual transparency of graphene. *Science*, 320(5881):1308, 2008. URL <http://www.sciencemag.org/content/320/5881/1308.abstract>.
- [4] Phaedon Avouris, Zhihong Chen, and Vasili Perebeinos. Carbon-based electronics. *Nat Nano*, 2:605–615, 2007. URL <http://dx.doi.org/10.1038/nnano.2007.300>.
- [5] N. Nemeč, B. Biel, G. Niebler, F. Triozon, G. Cuniberti, A. Cresti, and S. Roche. Charge transport in disordered graphene-based low dimensional materials. *Nano Research*, 1(5):361–, 2008. URL http://nano.tu-dresden.de/pages/paper_131.html.
- [6] F. Bonaccorso, Z. Sun, T. Hasan, and A. C. Ferrari. Graphene photonics and optoelectronics. *Nat Photon*, 4:611–622, 2010. URL <http://dx.doi.org/10.1038/nphoton.2010.186>.
- [7] Frank Schwierz. Graphene transistors. *at Nano*, 5:487–496, 2010. URL <http://dx.doi.org/10.1038/nnano.2010.89>.
- [8] Fengnian Xia, Thomas Mueller, Yu ming Lin, Alberto Valdes-Garcia, and Phaedon Avouris. Ultrafast graphene photodetector. *Nat Nano*, 4:839–843, 2009. URL <http://dx.doi.org/10.1038/nnano.2009.292>.

- [9] Thomas Mueller, Fengnian Xia, and Phaedon Avouris. Graphene photodetectors for high-speed optical communications. *Nat Photon*, 4:297–301, 2010. URL <http://dx.doi.org/10.1038/nphoton.2010.40>.
- [10] K. I. Bolotin, K. J. Sikes, J. Hone, H. L. Stormer, and P. Kim. Temperature-dependent transport in suspended graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 101:096802, 2008. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.101.096802>.
- [11] Eduardo V. Castro, H. Ochoa, M. I. Katsnelson, R. V. Gorbachev, D. C. Elias, K. S. Novoselov, A. K. Geim, and F. Guinea. Limits on charge carrier mobility in suspended graphene due to flexural phonons. *Phys. Rev. Lett.*, 105:266601, 2010. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.105.266601>.
- [12] Gerardo G. Naumis. Internal mobility edge in doped graphene: Frustration in a renormalized lattice. *Phys. Rev. B*, 76:153403, 2007. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.76.153403>.
- [13] Aaron Bostwick, Jessica L. McChesney, Konstantin V. Emtsev, Thomas Seyller, Karsten Horn, Stephen D. Kevan, and Eli Rotenberg. Quasiparticle transformation during a metal-insulator transition in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 103:056404, 2009. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.103.056404>.
- [14] 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.*, 81:109–162, 2009. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.81.109>.
- [15] Tsuneya Ando. Screening effect and impurity scattering in monolayer graphene. *Journal of the Physical Society of Japan*, 75(7):074716, 2006. URL <http://jpsj.ipap.jp/link?JPSJ/75/074716/>.
- [16] Vitor M. Pereira and A. H. Castro Neto. Strain engineering of graphene’s electronic structure. *Phys. Rev. Lett.*, 103:046801, 2009. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.103.046801>.
- [17] Nima Abedpour, Reza Asgari, and F. Guinea. Strains and pseudomagnetic fields in circular graphene rings. *Phys. Rev. B*, 84:115437, 2011. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.84.115437>.
- [18] Página. . URL http://www7.uc.cl/sw_educ/qda1106/CAP3.
- [19] H. W. Kroto, J. R. Heath, O’Brien, S. C., R. F. Curl, and R. E. Smalley. C60: Buckminsterfullerene. *Nature*, 318:162–163, 1985. URL <http://dx.doi.org/10.1038/318162a0>.

- [20] Fullerene. *Encyclopædia Britannica*, 2012. URL <http://www.britannica.com/EBchecked/topic/221916/fullerene>.
- [21] Sumio Iijima. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, 354:56–58, 1991. URL <http://dx.doi.org/10.1038/354056a0>.
- [22] G. Dresselhaus P. C. Eklund M. S. Dresselhaus. *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes: Their Properties and Applications*. Academic Press, 1996. URL <http://link.aip.org/link/?RSI/62/1/1>.
- [23] A. K. Geim and K. S. Novoselov. The rise of graphene. *Nat Mater*, 6:183–191, 2007. URL <http://dx.doi.org/10.1038/nmat1849>.
- [24] 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*, 306(5696):666–669, 2004. URL <http://www.sciencemag.org/content/306/5696/666.abstract>.
- [25] Neil Savage. Materials science: Super carbon. *Nature*, 483(7389):S30–S31, 2012. URL <http://dx.doi.org/10.1038/483S30a>.
- [26] A. K. Geim. Graphene: Status and prospects. *Science*, 324(5934):1530–1534, 2009. URL <http://www.sciencemag.org/content/324/5934/1530.abstract>.
- [27] F. Schedin, A. K. Geim, S. V. VMorozov, E. W. Hill, P. Blake, M. I. Katsnelson, and K. S. Novoselov. Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene. *Nat Mater*, 6:652–655, 2007. URL <http://dx.doi.org/10.1038/nmat1967>.
- [28] David L. Chandler. New material could lead to faster chips. *MITnews*, 2009. URL <http://web.mit.edu/newsoffice/2009/graphene-palacios-0319.html>.
- [29] Página. . URL <http://www.wisphysics.es/2010/10/la-fisica-del-grafeno>.
- [30] N. M. R. Peres, F. Guinea, and A. H. Castro Neto. Electronic properties of disordered two-dimensional carbon. *Phys. Rev. B*, 73, 2006. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.125411>.
- [31] Yuanbo Zhang, Yan-Wen Tan, Horst L. Stormer, and Philip Kim. Experimental observation of the quantum hall effect and berry’s phase in graphene. *Nature*, 176: 201–204, 2005. URL <http://dx.doi.org/10.1038/nature04235>.
- [32] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. Chiral tunnelling and the klein paradox in graphene. *Nat Phys*, 2:620–625, 2006. URL <http://dx.doi.org/10.1038/nphys384>.

- [33] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim. Two-dimensional atomic crystals. *Proceedings of The National Academy of Sciences*, 1021:10451–10453, 2005. URL http://www.condmat.physics.manchester.ac.uk/pdf/mesoscopic/publications/graphene/PNAS_2005.pdf.
- [34] A. H. Castro Neto and Francisco Guinea. Electron-phonon coupling and raman spectroscopy in graphene. *Phys. Rev. B*, 75:045404, 2007. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.75.045404>.
- [35] 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*, 78:201406, 2008. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.201406>.
- [36] F.J. López-Rodríguez and G.G. Naumis. Graphene under perpendicular incidence of electromagnetic waves: Gaps and band structure. *Philosophical Magazine*, 90(21):2977–2988, 2010. URL <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/14786431003757794>.
- [37] A. Lichnerowicz. Champs spinoriels et propagateurs en relativité générale. *Bull. Soc. Math. France*, 92:11–100, 1964. URL <http://www.scopus.com/record/display.url?eid=2-s2.0-0002040090&origin=inward&txGid=B4076D38A3A196F114FBB7BCA62B8F69.aqHV0EoE4xlIF3hgVWgA%3a8>.
- [38] N. Birrell and P. Davies. *Quantum fields in curved space*. Cambridge University Press, 1st ed edition, 1982. URL <http://link.aip.org/link/?RSI/62/1/1>.
- [39] C. Kittel. *Quantum Theory of Solids*. John Wiley and Sons, 2nd ed edition, 1987.
- [40] 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.*, 109:026101, 2012. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.109.026101>.
- [41] N. McLachlan. *Theory and Application of Mathieu Functions*. Clarendon, New York, 1st ed edition, 1951.
- [42] Richard Kerner, Gerardo G. Naumis, and Wilfrido A. Gómez-Arias. Bending and flexural phonon scattering: Generalized dirac equation for an electron moving in curved graphene. *Physica B: Condensed Matter*, 407(12):2002–2008, 2012. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921452612001548>.

-
- [43] Christian Sch. Bandstructure of graphene and carbon nanotubes: An exercise in condensed matter physics. *Carbon*, 51(2):1–15, 2000. URL <http://www.mendeley.com/research/bandstructure-graphene-carbon-nanotubes-exercise-condensed-matter-physics-5/>.