

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

INSTITUTO DE FÍSICA

HAMILTONIANO EFECTIVO DE DIRAC  
PARA EL GRAFENO DEFORMADO:  
PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y  
ÓPTICAS

TESIS PRESENTADA POR MAURICE OLIVA LEYVA  
PARA OBTENER EL GRADO DE DOCTOR EN CIENCIAS (FÍSICA)

DIRECTOR DE TESIS: DR. GERARDO GARCÍA NAUMIS  
MIEMBRO DEL COMITÉ TUTORAL: DRA. GABRIELA MURGUÍA ROMERO  
MIEMBRO DEL COMITÉ TUTORAL: DR. MIGUEL A. SOLÍS ATALA

2016

Departamento de Física-Química



*A mi hijo, mi ne y mi madre.*



---

## Agradecimientos

Quiero empezar expresando mi total agradecimiento al profe Gerardo. La historia de mi doctorado comenzó gracias a una arriesgada invitación suya, para que pudiera llegar de La Habana al Instituto de Física de la UNAM. Desde entonces he podido contar con su dedicación, pragmatismo, así como con su infinita paciencia. Sinceramente ha sido todo un lujo haber hecho ciencia bajo su dirección.

También quiero dar las gracias a Gabriela y a Miguel Ángel por el seguimiento del desarrollo de esta tesis. Sus muestras de confianza y total accesibilidad resultaron siempre de mucha ayuda.

En mi paso por el IFUNAM he tenido la dicha de contar con la amistad de Eduardo, Laura y Carlos. A ellos, mil gracias por los muchos momentos puntuales de cubaneo y por la permanente disposición para ayudarme en este y otros aspectos de la vida.

Estos años en México han estado marcados por el cariño inestimable de la familia Santana: los Jefes, Yas y el Guille. Las cosas seguro serían muy diferentes sin ellos. No supiera yo de whisky y frijoles colorados. Espero algún día poder retribuir en algo todo lo que han hecho y siguen haciendo por nosotros.

A los Pones, gracias por estar al pie del cañón, por cuidarnos, por ser unos abuelos tan especiales. Mona, nunca deje de hacer ese café de mañana.

A mis padres y a mi linda hermana, gracias por el apoyo y el amor inagotable de toda mi vida.

A mi Ne, mi esposa amada, GRACIAS por creer siempre que puedo llegar más alto. Tu constante motivación ha sido el pilar de cada uno de los logros hoy alcanzados. GRACIAS por ser la mejor persona con quien compartir este proyecto y los que están por venir. GRACIAS por traer la mayor felicidad de mi vida y el amor más puro: nuestro bebo hermoso. **LAI**

Finalmente, agradezco al Posgrado en Ciencias Físicas por la formación recibida y al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (*CONACyT*) por la beca otorgada para la realización de mis estudios de posgrado (490796).

---

## Índice general

<b>Resumen</b>	<b>IX</b>
<b>Publicaciones</b>	<b>XI</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Grafeno no deformado: una revisión</b>	<b>7</b>
2.1. Estructura cristalina . . . . .	7
2.2. Estructura electrónica . . . . .	9
2.3. Fermiones bidimensionales de Dirac . . . . .	12
2.4. Manifestaciones de partículas de Dirac . . . . .	13
2.4.1. Tunelaje de Klein . . . . .	13
2.4.2. Niveles relativistas de Landau . . . . .	15
2.4.3. Absorción óptica universal . . . . .	17
<b>3. Grafeno deformado uniformemente: propiedades electrónicas</b>	<b>19</b>
3.1. Red de panal anisotrópica . . . . .	19
3.1.1. Relación de dispersión . . . . .	20
3.1.2. Hamiltoniano efectivo de Dirac . . . . .	22
3.2. Deformaciones uniformes del grafeno . . . . .	26
3.2.1. Relación de dispersión . . . . .	28

3.2.2. Hamiltoniano efectivo de Dirac . . . . .	32
3.3. Una distorsión uniforme (no mecánica) del grafeno . . . . .	35
3.3.1. Relación de dispersión . . . . .	36
3.3.2. Hamiltoniano efectivo de Dirac . . . . .	39
<b>4. Modulación de las propiedades ópticas</b>	<b>41</b>
4.1. Conductividad óptica de un sistema de Dirac anisotrópico . . . . .	41
4.2. Dicroísmo y transmitancia de un sistema de Dirac anisotrópico . . . . .	43
4.3. Grafeno deformado uniformemente: propiedades ópticas . . . . .	46
4.3.1. Deformación uniaxial . . . . .	49
4.4. Grafeno distorsionado: propiedades ópticas . . . . .	51
<b>5. Deformaciones no uniformes</b>	<b>53</b>
5.1. De deformaciones uniformes a no uniformes . . . . .	53
5.2. Hamiltoniano uniforme: una revisión . . . . .	54
5.3. Hamiltoniano generalizado de Dirac bajo deformaciones no uniformes	56
5.4. Campos pseudomagnéticos . . . . .	58
5.5. Efectos de una velocidad de Fermi dependiente de la posición . . . . .	61
<b>6. Deformaciones dependientes del tiempo</b>	<b>65</b>
6.1. Grafeno bajo una onda de deformación . . . . .	65
6.2. Estados tipo Volkov . . . . .	67
6.3. Efectos de la onda de deformación . . . . .	70
<b>7. Conclusiones</b>	<b>75</b>
<b>A. Estados de Volkov</b>	<b>77</b>
<b>Referencias</b>	<b>81</b>



---

## Resumen

En esta tesis estudiamos teóricamente los cambios en las propiedades electrónicas y ópticas del grafeno debido a deformaciones mecánicas, dentro del formalismo de la ecuación de Dirac.

Para el caso del grafeno deformado uniformemente obtenemos el hamiltoniano efectivo de Dirac en función del tensor de deformaciones. En este cálculo, la determinación del corrimiento de los puntos de Dirac es crucial para la correcta descripción de la anisotropía inducida por la deformación. Además, a partir de la fórmula de Kubo calculamos la conductividad óptica como función del tensor de deformaciones, lo cual permite evaluar de forma analítica la transmitancia y el carácter dicróico del grafeno deformado uniformemente. Nuestros resultados muestran de forma general, y en concordancia con los experimentos, cómo la transmitancia y el dicroísmo del grafeno pueden ser modulados como función de la magnitud de la deformación y de la polarización incidente.

Del mismo modo, para el grafeno bajo deformaciones no uniformes reportamos un hamiltoniano de Dirac generalizado. En este caso dilucidamos cómo una deformación no uniforme imita el efecto de un campo pseudomagnético. Además, demostramos analíticamente que una velocidad de Fermi dependiente de la posición provoca una inhomogeneidad en la densidad de probabilidad de los portadores de carga. Finalmente, estudiamos el caso del grafeno bajo una onda de sonido. Para tal deformación, dependiente de la posición y del tiempo, mapeamos el problema al caso del grafeno bajo una onda pseudoelectromagnética y obtenemos funciones de onda tipo Volkov. La onda de sonido tiene un efecto de colimación sobre los portadores de carga.

---

## Abstract

We theoretically study the changes in the electronic and optical properties of graphene due to mechanical deformations, within the framework of the Dirac equation.

In the case of graphene under a uniform strain, we obtain the effective Dirac Hamiltonian as a function on the strain tensor. In our derivation, the determination of the shift of the Dirac points is a crucial point for the correct description of the strain-induced anisotropy. Also, using the Kubo formula, we calculate the optical conductivity as a function of the strain tensor, which allows us to evaluate (in an analytical manner) the degree of dichroism and the transparency of the strained graphene. Our theoretical predictions agree with experimental results and show how the transmittance and the dichroism can be modulated as a function of the deformation magnitude and the incident polarization.

On the other hand, we report the generalized Dirac Hamiltonian for graphene under a nonuniform deformation. For this case, we elucidate how a nonuniform deformation mimics the effect of a pseudomagnetic field. Furthermore, we analytically demonstrated that a position-dependent Fermi velocity induces an inhomogeneity in the carrier probability density. Finally, we study the case of graphene under a sound wave. For such time- and position-dependent deformation, we map the problem to the case of graphene under a pseudoelectromagnetic wave and find Volkov-type wavefunctions. The sound wave produces a collimation effect on the charge carriers.

---

## Publicaciones

Como parte del trabajo de investigación presentado en esta tesis resultaron las siguientes publicaciones:

1. M. Oliva-Leyva y Gerardo G. Naumis, “*Understanding electron behavior in strained graphene as a reciprocal space distortion*”, *Phys. Rev. B* **88** 085430, (2013).
2. M. Oliva-Leyva y Gerardo G. Naumis, “*Anisotropic AC conductivity of strained graphene*”, *J. Phys.: Condens. Matter* **26**, 125302 (2014).  
“*Corrigendum: Anisotropic AC conductivity of strained graphene (2014 J. Phys.: Condens. Matter 26 125302)*”, *J. Phys.: Condens. Matter* **26**, 279501 (2014).
3. M. Oliva-Leyva y Gerardo G. Naumis, “*Tunable dichroism and optical absorption of graphene by strain engineering*”, *2D Mater.* **2**, 025001 (2015).
4. M. Oliva-Leyva y Gerardo G. Naumis, “*Generalizing the Fermi velocity of strained graphene from uniform to nonuniform strain*”, *Phys. Lett. A* **379**, 2645 (2015).
5. M. Oliva-Leyva y Gerardo G. Naumis, “*Sound waves induce Volkov-like states, band structure and collimation effect in graphene*”, *J. Phys.: Condens. Matter* **28**, 025301 (2016).

6. M. Oliva-Leyva y Gerardo G. Naumis, “*Effective Dirac Hamiltonian for anisotropic honeycomb lattices: Optical properties*”, *Phys. Rev. B* **93**, 035439 (2016).
7. Gerardo G. Naumis, M. Oliva-Leyva, S. Barraza-López y H. Terrones, “*Electronic and optical properties of strained graphene and other similar 2D materials: a review*”, (artículo de revisión en preparación para ser publicado en **Rep. Prog. Phys.**).

## Introducción

El carbono es el pilar básico de la química orgánica, lo cual encuentra explicación en su variedad de hibridaciones entre orbitales  $s$  y  $p$  al formar enlaces. Esta propiedad de catenación permite al carbono presentar una gran familia de alótropos con muy diversas propiedades, entre ellas, la dimensionalidad. El diamante y el grafito son dos de sus formas alotrópicas (tridimensionales) más comunes, cuyo uso se remonta a miles de años. No fue hasta finales del siglo XX, que la lista de alótropos de carbono engrosó con el descubrimiento en 1984 de los fullerenos [1], de dimensionalidad cero; y en 1991, de los unidimensionales nanotubos [2].

La existencia de una forma alotrópica bidimensional estable había sido cuestionada teóricamente por el teorema de Mermin-Wagner [3], según el cual las fluctuaciones térmicas en una y dos dimensiones son suficientemente importantes para que no se pueda definir con rigor el orden cristalino a largo alcance. Sin embargo, en 2004 A. K. Geim y K. S. Novoselov obtuvieron *grafeno*<sup>1</sup> [5, 6], una monocapa bidimensional de átomos de carbono dispuestos en una red cristalina hexagonal en forma de panal y enlazados por una hibridación orbital  $sp^2$ . El enunciado del teorema de Mermin-Wagner aparentemente era violado por el grafeno; sin embargo, en el corrugamiento ligero intrínseco de este cristal bidimensional se encontraba la explicación de su estabilidad termodinámica [7].

Desde su descubrimiento, por el cual fueron galardonados Geim y Novoselov con el Premio Nobel de Física en 2010, el grafeno ha sido objeto de estudio de una verdadera avalancha de trabajos científicos. El único precedente de una actividad

<sup>1</sup>El término grafeno (graphene en inglés) fue acuñado en 1962 [4].

investigativa tan intensa e interdisciplinaria como la desarrollada en torno al grafeno es el estudio de los superconductores de alta temperatura crítica, iniciada en los años ochenta. La razón de tanta actividad es debida a las propiedades inusuales de este material, sobre las cuales se basan prometedoras aplicaciones. Citemos algunas de estas propiedades:

- Propiedades electrónicas: Muy alta movilidad de portadores de carga (hasta  $2 \times 10^5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  para grafeno suspendido [8]), elevada velocidad de Fermi  $v_F \approx 10^6 \text{ cm/s}$ , transporte casi balístico [9] y menor resistividad que la plata ( $10^{-8} \Omega \text{ m}$  a temperatura ambiente).
- Propiedades mecánicas: Tiene una resistencia mecánica excepcional,  $42 \text{ N/m}$ , la cual corresponde con un módulo de Young de  $1 \text{ TPa}$  [10], sin embargo, es flexible [11]. Además, puede ser deformado elásticamente hasta un  $25 \%$ , mientras que la mayoría de los sólidos dejan de ser elásticos por encima del  $3 \%$ . Por ejemplo, el silicio se rompe para deformaciones por encima del  $1.5 \%$ .
- Propiedades químicas: A diferencia del grafito, uno de los materiales más inertes, la actividad química del grafeno (la adsorción) lo convierte en una plataforma para crear nuevos cristales bidimensionales [12, 13].
- Propiedades térmicas: A temperatura ambiente posee una conductividad térmica del orden de  $5 \times 10^3 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ , mayor que la del diamante [14].
- Propiedades ópticas: Es casi “transparente”, pues absorbe el  $2.3 \%$  de la intensidad de la luz que llega a su superficie [15, 16].

La combinación única de propiedades superlativas en un mismo material convierten al grafeno en un paradigma creíble para nuevas tecnologías [17]: transistores, amplificadores de altas frecuencias, electrodos transparentes, pantallas flexibles, dispositivos de almacenamiento de energía, composites, sensores, celdas solares, etc. Quizá el ejemplo más elocuente sobre la esperanza en el ámbito académico y tecnológico de que este material cambie nuestra vida cotidiana es el megaproyecto europeo *Graphene Flagship*. Sin precedente histórico, por contar con un presupuesto de

---

1000 millones de euros a 10 años contados desde 2013, *Graphene Flagship* tiene la misión de conducir al grafeno, y a otros materiales bidimensionales, de los laboratorios académicos a la sociedad.

El grafeno no solo es de interés tecnológico, también es interesante desde un punto de vista teórico, pues el comportamiento de los portadores de carga no está descrito por la ecuación de Schrödinger como ocurre usualmente en Física del Estado Sólido. En el grafeno los portadores de carga se comportan como partículas relativistas sin masa, lo cual puede ser entendido de su peculiar estructura de bandas a bajas energías. El primer trabajo sobre el grafeno fue realizado por Wallace en 1947 [18], intentando comprender la estructura de bandas del grafito a partir de la del grafeno. Usando un modelo de amarre fuerte, Wallace encontró que la relación de dispersión es lineal cerca de las esquinas de la primera zona de Brillouin, las que son llamadas puntos de Dirac. Este resultado conduce a que los portadores de carga puedan ser descritos formalmente por un hamiltoniano tipo Dirac [19–21]. Esta propiedad del grafeno lo convierte en un puente entre la Física de la Materia Condensada y la Electrodinámica Cuántica [22]. Fenómenos cuánticos relativistas que solo se podrían pensar a altas energías, necesitando para ello costosas y colosales instalaciones, ahora son posibles de estudiar en un escenario muy barato.

La “paradoja de Klein”, tunelamiento con transparencia perfecta ante barreras de potencial muy altas y anchas, es uno de esos fenómenos relativistas descritos en contextos exóticos de Física de Partículas, Nuclear y Astrofísica, el cual puede ser investigado en un experimento conceptualmente simple basado en el grafeno [23]. Sin embargo, desde un punto de vista tecnológico el tunelamiento de Klein en grafeno representa un reto porque las barreras de potencial que se utilizan para localizar los portadores en semiconductores, y fabricar transistores u otros dispositivos, no pueden confinar a los portadores de carga en el grafeno. Para resolver esta dificultad y poder controlar a los portadores en el grafeno, se han propuesto varias alternativas, entre las que podemos citar la ingeniería de deformaciones (en inglés *strain-engineering*). Este concepto, el cual tiene una historia exitosa en la tecnología del silicio deformado [24], trata de tomar ventaja de la gran elasticidad del grafeno para modificar sus propiedades físicas y con ello mejorar su funcionalidad tecnológica.

Actualmente, un gran número de efectos inducidos por deformaciones estructurales en el grafeno han sido reportados, tales como, aparición de una brecha energética en la estructura de bandas [25, 26], cuantización de Landau a cero campo magnético [27, 28], modulación de la absorción óptica [29, 30], así como un incremento de la reactividad química [31], la respuesta piezoresistiva [32] y la respuesta fotoeléctrica [33]. Tales efectos hacen que los sensores de deformaciones, basados en el grafeno, sean un campo muy prominente en nanotecnología [34–36]. Además, desde un punto de vista de investigación básica, el grafeno deformado provee una excelente plataforma para estudiar fenómenos exóticos como, superconductividad [37, 38], comportamiento electrónico mixto Dirac-Schrödinger [39, 40], espectro fractal [41, 42] y aislantes topológicos [43, 44], entre otros [45].

En la literatura existen diferentes enfoques teóricos para investigar la influencia de las deformaciones estructurales sobre las propiedades electrónicas del grafeno. Un enfoque desde la Teoría Cuántica de Campos en espacios curvos ha sido usado alternativamente para predecir las implicaciones electrónicas debidas a deformaciones fuera del plano del grafeno [46–48]. Además, métodos basados en consideraciones de simetría se han empleado para construir todos los términos posibles del hamiltoniano efectivo de Dirac para el grafeno en presencia de deformaciones no uniformes [49–51]. Más recientemente, una formulación basada en conceptos de geometría diferencial han revelado cómo la estructura atómica de las membranas cristalinas bidimensionales rigen sus propiedades electrónicas, mecánicas y químicas [52–55]. Sin embargo, el marco teórico más popular para explorar el concepto de *strain engineering* es basado en la combinación de una aproximación de amarre fuerte y teoría lineal de la elasticidad [56, 57]. Este enfoque, en el límite al continuo, predice la existencia de campos pseudomagnéticos, el efecto electrónico debido a deformaciones no uniformes más estudiado.

En este contexto, la presente tesis doctoral tiene como objetivo principal obtener un hamiltoniano efectivo de Dirac para el grafeno deformado partiendo de una aproximación de amarre fuerte. La estructura de la tesis es la siguiente:

- En el Capítulo 2, revisamos la derivación del hamiltoniano de Dirac para el grafeno prístino (no deformado) y discutimos algunas de sus consecuencias sobre las propiedades de transporte.



- En el Capítulo 3, obtenemos el hamiltoniano efectivo de Dirac para el grafeno bajo deformaciones uniformes. En la derivación presentada se tiene en cuenta el corrimiento de los puntos de Dirac en el espacio recíproco debido a las deformaciones, lo cual resulta muy relevante para describir correctamente la anisotropía del grafeno deformado.
- En el Capítulo 4, calculamos la conductividad y la absorción óptica de sistemas de Dirac anisotrópicos, resultados que son particularizados al caso del grafeno deformado uniformemente.
- En el Capítulo 5, construimos el hamiltoniano efectivo de Dirac para el grafeno bajo deformaciones no uniformes, teniendo en cuenta que este reproduzca adecuadamente el caso uniforme. Aquí los campos pseudomagnéticos son obtenidos a partir del corrimiento de los puntos de Dirac. Además, se discuten los efectos sobre las funciones de onda debidos a una velocidad de Fermi dependiente de la posición.
- En el Capítulo 6, estudiamos los efectos electrónicos de una onda de sonido que se propaga en el grafeno. Para ello tomamos ventaja de la equivalencia entre deformaciones (dependientes de la posición y del tiempo) y campos pseudo-electromagnéticos que subyace en la descripción efectiva a baja energía para el grafeno.
- Finalmente, en el Capítulo 7, resumimos las principales contribuciones de esta tesis doctoral.



## Grafeno no deformado: una revisión

En este capítulo revisamos el comportamiento electrónico a baja energía del grafeno prístino, es decir, no dopado, no deformado e infinito. La revisión está enfocada en mostrar el hamiltoniano de Dirac efectivo para el grafeno prístino y discutir algunas de las consecuencias sobre las propiedades de transporte de los portadores de carga.

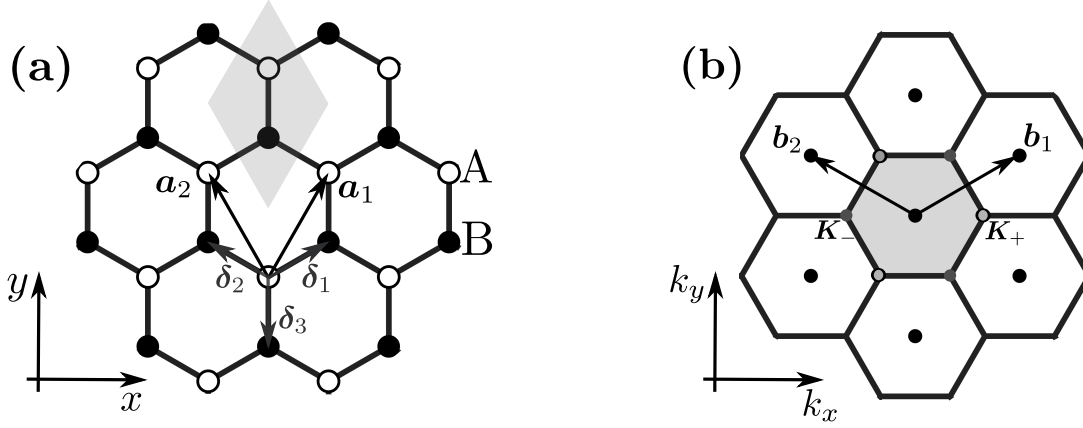
### 2.1. Estructura cristalina

En el grafeno los átomos de carbono forman un arreglo bidimensional en forma de red de panal, llamado *honeycomb lattice* en la literatura inglesa. Esta estructura cristalina hexagonal puede ser caracterizada por una red de Bravais triangular y una base de dos átomos, indicados como A y B en la Figura 2.1 (a). Los vectores base pueden ser definidos como

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 3), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}, 3), \quad (2.1)$$

donde  $a = 1.42 \text{ \AA}$  es la distancia entre átomos de carbono. Nótese que el sistema coordenado  $xy$  se ha elegido con el eje  $x$  ( $y$ ) en una de las direcciones *zigzag* (*armchair*) de la red del grafeno.

Otra forma de describir la red del grafeno es como una red triangular de tipo A (círculos blancos) interpretada por una red triangular de tipo B (círculos negros). En la Figura 2.1 (a) puede verse que cada átomo de tipo A está rodeado de tres



**Figura 2.1:** (a) Estructura cristalina del grafeno, cuyos vectores base son denotados por  $\mathbf{a}_1$  y  $\mathbf{a}_2$ . Los vectores  $\delta_i$  conectan cada átomo de la subred A (círculos blancos) con sus tres primeros vecinos de la subred B (círculos negros). (b) Red recíproca del grafeno de vectores base  $\mathbf{b}_1$  y  $\mathbf{b}_2$ . El hexágono gris representa la primera zona de Brillouin.

átomos de tipo B (primeros vecinos), y viceversa. Los tres vectores que conectan a un átomo de tipo A con sus tres primeros vecinos son

$$\delta_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 1), \quad \delta_2 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}, 1), \quad \delta_3 = a(0, -1). \quad (2.2)$$

Los vectores base  $\{\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2\}$  de la red recíproca del grafeno pueden ser determinados de la condición  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ , de donde se obtienen

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(\sqrt{3}, 1), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(-\sqrt{3}, 1). \quad (2.3)$$

En la Figura 2.1 (b) se muestra la red recíproca, la cual también es una red hexagonal pero está rotada  $90^\circ$  respecto a la red directa. La primera zona de Brillouin (1BZ) es construida como la celda de Wigner-Seitz de la red recíproca. De las seis esquinas de la primera zona de Brillouin solamente dos no son equivalentes, como puede ser el par  $\mathbf{K}_\pm = (\pm\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0)$  (véase Figura 2.1 (b)). El resto de las esquinas pueden ser obtenidas a partir de  $\mathbf{K}_+$  o  $\mathbf{K}_-$  más un vector de la red recíproca.

## 2.2. Estructura electrónica

Un átomo de carbono aislado tiene la configuración electrónica  $1s^2 2s^2 2p^2$ , con 4 electrones de valencia. En el grafeno, los orbitales  $2s, 2p_x, 2p_y$  se combinan para formar tres orbitales de hibridación de tipo  $sp^2$ , los cuales son los responsables de fuertes enlaces covalentes (enlaces  $\sigma$ ) entre átomos vecinos. Estos enlaces  $\sigma$  determinan la estabilidad energética y las propiedades elásticas del grafeno. Además, conducen a la formación de las bandas  $\sigma$ , las cuales están separadas por una brecha energética grande ( $>6$  eV) alrededor de la energía de Fermi (véase la Figura 2.2). Por esta razón, la contribución de las bandas  $\sigma$  a las propiedades electrónicas del grafeno es comúnmente despreciada.

El cuarto electrón de valencia ocupa el orbital  $p_z$  restante, que es perpendicular al plano del grafeno. La interacción de los orbitales  $p_z$  entre átomos vecinos (llamada interacción  $pp\pi$ ) conduce a la formación de dos bandas  $\pi$ , las cuales describen las excitaciones electrónicas de baja energía del grafeno. A continuación, se describe la estructura electrónica de las dos bandas  $\pi$  del grafeno a partir de un modelo de amarre fuerte solo a primeros vecinos.

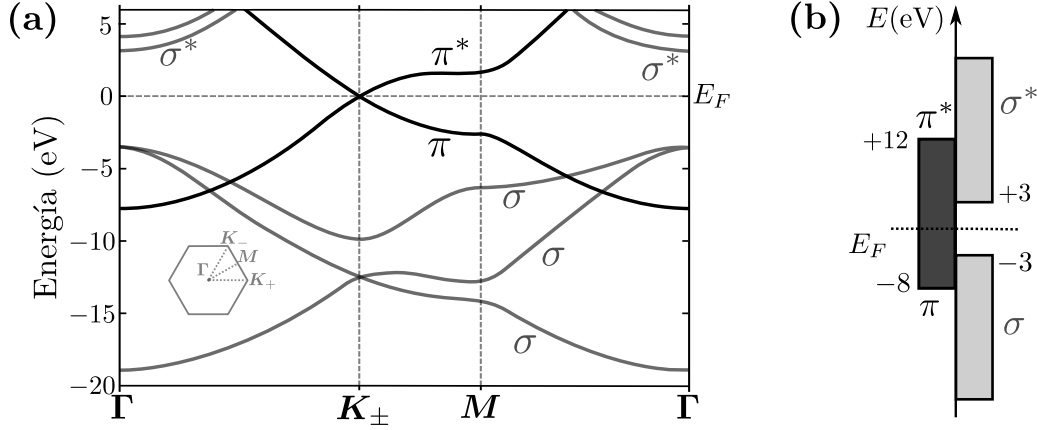
El hamiltoniano de amarre fuerte que describe en el grafeno el salto de un electrón del átomo de tipo A(B) a uno de sus tres átomos vecinos de tipo B(A), puede ser escrito como [58]

$$H = -t \sum_{\mathbf{R}_i} \sum_{n=1}^3 (|A_{\mathbf{R}_i}\rangle \langle B_{\mathbf{R}_i+\delta_n}| + |B_{\mathbf{R}_i+\delta_n}\rangle \langle A_{\mathbf{R}_i}|) \quad (2.4)$$

donde  $t$  es la integral de salto entre primeros vecinos,  $\mathbf{R}_i$  suma sobre todos los sitios de la subred A y el estado vector  $|A_{\mathbf{R}_i}\rangle$  es tal que  $\langle A_{\mathbf{R}_i}|\mathbf{r}\rangle = p_z(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$  es la función de onda del orbital  $p_z$  de un átomo de carbono en el sitio  $\mathbf{R}_i$ . Una notación similar es usada para  $|B_{\mathbf{R}_i+\delta_n}\rangle$ .

Según el *ansatz* de Bloch, las autofunciones del hamiltoniano (2.4) pueden ser desarrolladas en la forma

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{R}_j} (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} \Psi_A(\mathbf{k}) |A_{\mathbf{R}_j}\rangle + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j+\delta_3)} \Psi_B(\mathbf{k}) |B_{\mathbf{R}_j+\delta_3}\rangle), \quad (2.5)$$



**Figura 2.2:** (a) Estructura de bandas electrónicas del grafeno. (b) Las bandas ocupadas  $\sigma$  y las bandas desocupadas  $\sigma^*$  están separadas por una brecha energética grande, mientras que las bandas  $\pi$  y  $\pi^*$  descansan en la vecindad de la energía de Fermi. Adaptada de [59].

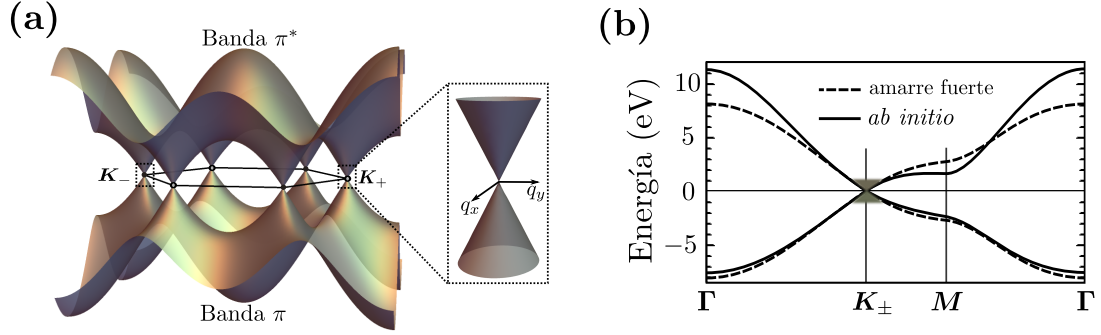
donde  $N_c$  es el número de celdas unitarias,  $\Psi_A(\mathbf{k})$  y  $\Psi_B(\mathbf{k})$  son coeficientes y  $\mathbf{k}$  es el vector de onda del electrón. Si el solapamiento entre orbitales  $p_z$  de diferentes sitios es despreciado, la ecuación de Schrödinger  $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$  se convierte en el problema matricial

$$\begin{pmatrix} 0 & -t \sum_{n=1}^3 e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_n} \\ -t \sum_{n=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_n} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A(\mathbf{k}) \\ \Psi_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_A(\mathbf{k}) \\ \Psi_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

de donde inmediatamente se obtienen las dos bandas  $\pi$ ,

$$\begin{aligned} E_{\pm}(\mathbf{k}) &= \pm |t \sum_{n=1}^3 e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_n}|, \\ &= \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}k_x a) + 4 \cos(\sqrt{3}k_x a/2) \cos(3k_y a/2)}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

las cuales se ilustran en la Figura 2.3 (a). La banda de energía negativa corresponde a la banda de valencia, mientras la banda de energía positiva corresponde a la banda de conducción. Como se puede demostrar por evaluación directa de (2.7), ambas bandas se anulan en las seis esquinas de la primera zona de Brillouin, en particular,  $E_{\pm}(\mathbf{K}_{\pm}) = 0$ . En consecuencia, el grafeno prístino no tiene una brecha energética



**Figura 2.3:** (a) Estructura de las bandas  $\pi$  del grafeno obtenidas a partir de la aproximación de amarre fuerte a primeros vecinos. En la ampliación se muestra la relación de dispersión lineal (conos de Dirac) alrededor de una de las esquinas de la primera zona de Brillouin. (b) Cálculos *ab initio* y la relación de dispersión (2.7), con  $t = 2.7$  eV, muestran una concordancia excelente a bajas energías (alrededor del punto  $K_{\pm}$ ). Adaptada de [60].

en su estructura de bandas, por lo que presenta un comportamiento semimetálico. Con un solo electrón libre por cada átomo de carbono, la banda de valencia se encuentra completamente llena y la banda de conducción está vacía, al menos para el grafeno eléctricamente neutro. Por lo tanto, la energía de Fermi es cero ( $E_F = 0$ ) y la superficie de Fermi únicamente consiste de los puntos  $K_+$  y  $K_-$ . En la Figura 2.3 (b) se muestra una comparación entre la relación de dispersión (2.7) y cálculos *ab initio* para las bandas  $\pi$ . Usando la integral de salto  $t$  como parámetro de ajuste, se observa una concordancia excelente a bajas energías entre ambos métodos [60]. Este procedimiento teórico es usualmente empleado para determinar el valor preciso de la integral de salto  $t = 2.7$  eV, el cual es difícil de determinar analíticamente.

Si la relación de dispersión (2.7) se desarrolla alrededor de alguna de las esquinas de la primera zona de Brillouin, usando la sustitución  $\mathbf{k} = \mathbf{K}_{\pm} + \mathbf{q}$ , se obtiene

$$E_{\pm}(\mathbf{q}) = \pm \hbar v_F |\mathbf{q}|, \quad (2.8)$$

donde

$$v_F = \frac{3ta}{2\hbar}, \quad (2.9)$$

es la velocidad de Fermi (velocidad de grupo electrónica), que es aproximadamente  $10^6$  m/s.

Como se mostrará en la siguiente sección, la relación de dispersión lineal (2.8) de las bandas  $\pi$ , en la vecindad de las seis esquinas de la primera zona de Brillouin, implica que los portadores de carga de baja energía en el grafeno se comportan como fermiones relativistas de masa cero, descritos por la ecuación de Dirac [6, 61]. Este hecho justifica el nombre de **puntos de Dirac** para  $\mathbf{K}_+$  y  $\mathbf{K}_-$ , donde las bandas (2.7) se tocan. Al mismo tiempo, la relación de dispersión (2.8) alrededor de los puntos de Dirac es nombrada **conos o valles de Dirac**.

### 2.3. Fermiones bidimensionales de Dirac

A partir de (2.6), el hamiltoniano de amarre fuerte en el espacio- $\mathbf{k}$  puede ser escrito como

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{k}) \\ f^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

donde  $f(\mathbf{k}) = -t \sum_{n=1}^3 e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta_n}$ . Sin embargo, para obtener el hamiltoniano efectivo que describa el comportamiento electrónico de los portadores de carga a baja energía se debe desarrollar el hamiltoniano (2.10) alrededor de los puntos  $\mathbf{K}_\pm$ . Tal procedimiento está justificado por el hecho de que aún en condiciones reales de dopaje la energía de Fermi en el grafeno es cercana a donde se tocan los conos de Dirac,  $|E_F| \ll t$ . Entonces, llevando a cabo la linealización del hamiltoniano (2.10) en la vecindad de los puntos de Dirac  $\mathbf{K}_\pm$ , en la forma  $H(\mathbf{k} = \mathbf{K}_\pm + \mathbf{q}) \approx \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} H|_{\mathbf{K}_\pm}$ , se obtiene

$$H_\xi(\mathbf{q}) = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \xi q_x - i q_y \\ \xi q_x + i q_y & 0 \end{pmatrix} = \hbar v_F (\xi \sigma_x q_x + \sigma_y q_y), \quad (2.11)$$

donde  $\{\sigma_x, \sigma_y\}$  son las dos primeras matrices de Pauli<sup>1</sup>, y el índice de valle  $\xi$  toma los valores  $\xi = +1$  para el valle  $\mathbf{K}_+$  y  $\xi = -1$  para el valle  $\mathbf{K}_-$ .

En correspondencia con la aproximación de masa efectiva, o equivalentemente,

<sup>1</sup> Usualmente las matrices de Pauli están definidas como

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$



con el método  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  [62], si ahora se hace la sustitución

$$\mathbf{q} \rightarrow -i\nabla, \quad (2.12)$$

el hamiltoniano (2.10) puede ser identificado como un análogo bidimensional del hamiltoniano de Dirac para fermiones sin masa [63]. Como diferencias notables, en el grafeno el rol de la velocidad de la luz  $c$  lo desempeña la velocidad de Fermi, la cual es 300 veces menor,  $v_F \approx c/300$ . Además, en (2.10) las matrices de Pauli no operan sobre el espín, sino sobre el grado de libertad asociado a las subredes A y B, llamado pseudo-espín. Las componentes de los espinores que son autofunciones del hamiltoniano (2.10) describen las distribuciones de los portadores de carga sobre las subredes A y B. Explícitamente las autofunciones de (2.10) están dadas por

$$|\Psi_{\xi, \pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{i\xi\vartheta_{\mathbf{q}}} \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

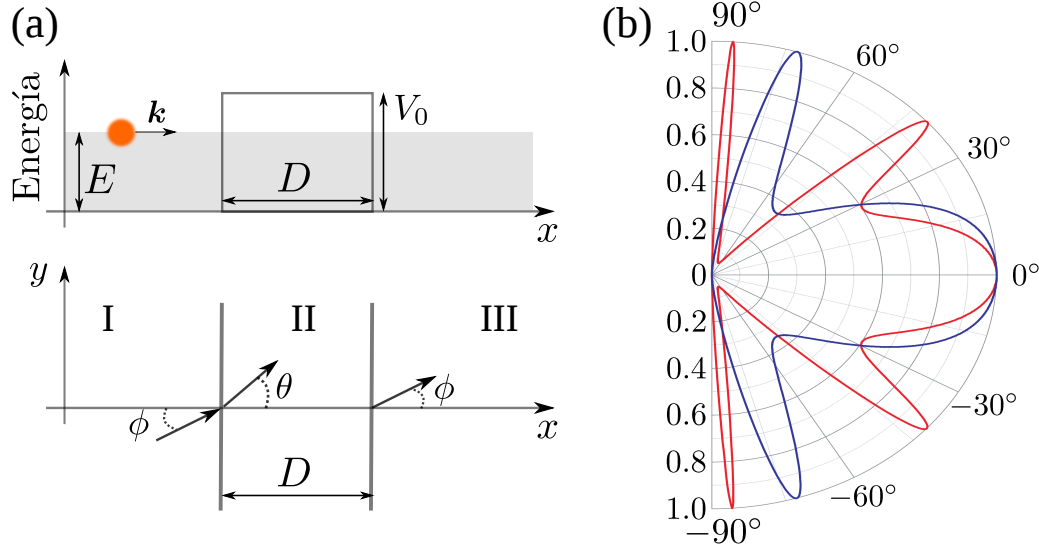
donde  $\arctan \vartheta_{\mathbf{q}} = q_y/q_x$ , y con las autoenergías  $E_{\pm}(\mathbf{q}) = \pm\hbar v_F |\mathbf{q}|$ , en correspondencia con (2.8).

## 2.4. Manifestaciones de partículas de Dirac

La similitud entre los portadores de carga en el grafeno y las partículas ultrarrelativistas posibilita que fenómenos descritos en el contexto de la mecánica cuántica relativista puedan ser observados en un laboratorio de materia condensada. A continuación presentamos tres ejemplos que ilustran las propiedades inusuales del grafeno debido a que alberga fermiones de Dirac sin masa.

### 2.4.1. Tunelaje de Klein

De la mecánica cuántica no relativista se conoce que la probabilidad de que una partícula atraviese una barrera de potencial decae exponencialmente con el ancho y la altura de la barrera [64]. En contraste, las partículas ultrarrelativistas tienen la habilidad de penetrar las barreras de potencial con probabilidades muy altas (casi 1), con arbitrariedad de la altura y el ancho de la barrera. Este contraintuitivo



**Figura 2.4:** (a) Esquema del proceso de dispersión de los electrones de Dirac, con energía  $E$ , por una barrera de potencial de ancho  $D$  y altura  $V_0$ . (b) Probabilidad de transmisión  $T$  como función del ángulo de incidencia  $\phi$ . La curva azul corresponde a una barrera de potencial de altura  $V_0 = 200$  meV, mientras la roja es para  $V_0 = 285$  meV. En ambos casos  $E = 80$  meV y  $D = 100$  nm. Adaptada de [23].

efecto túnel relativista, conocido como tunelaje de Klein [65, 66], fue predicho para electrones en el grafeno [23] y, posteriormente, confirmado experimentalmente [67, 68]. Katsnelson y colaboradores [23] calcularon la probabilidad de transmisión  $T$  cuando los electrones en el grafeno inciden sobre una barrera de potencial rectangular de la forma:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{en la región II,} \\ 0 & \text{en la regiones I y III,} \end{cases} \quad (2.14)$$

infinita en la dirección  $y$ . El esquema general del problema de dispersión estudiado en [23] se ilustra en la Figura 2.4 (a). La función de onda fue construida en las tres diferentes regiones en términos de ondas incidentes y reflejadas. Al exigir la continuidad de la función de onda en la fronteras  $0$  y  $D$  obtuvieron que la probabilidad de transmisión como función del ángulo de incidencia  $\phi$  es

$$T(\phi) = \frac{\cos^2 \phi \cos^2 \theta}{\cos^2(qD) \cos^2 \phi \cos^2 \theta + \sin^2(qD)(1 - \sin \theta \sin \phi)^2}, \quad (2.15)$$

donde  $q = \sqrt{(V_0 - E)^2 - E^2 \sin^2 \phi} / \hbar v_F$  y  $\tan \theta = E \sin \phi / \hbar v_F q$ . La expresión (2.15) inmediatamente arroja que para incidencia normal ( $\phi = 0$ ) cualquier barrera es perfectamente transparente ( $T(\phi = 0) = 1$ ). Esta característica única de fermiones de Dirac sin masa puede explicarse en términos de la conservación del pseudo-espín. Adicionalmente, aparecen “ángulos mágicos” para los cuales la barrera también se vuelve transparente (véase la Figura 2.4 (b)).

El tunelaje de Klein en el grafeno ha resultado un obstáculo para el desarrollo de transistores basados en este material. Los electrones, al penetrar las barreras de potencial con facilidad, no permiten que se pueda conseguir eficientemente el estado de cero corriente (estado *off*) del transistor. Al día de hoy este hecho sigue impulsando la búsqueda de un método para abrir una brecha energética en la estructura de bandas del grafeno, sin que ello conlleve a una degradación de la alta movilidad de sus portadores de carga.

### 2.4.2. Niveles relativistas de Landau

Un gas de electrones no relativistas confinados en el plano  $xy$  en presencia de un campo magnético uniforme  $B$  en la dirección  $z$  presenta un espectro discreto dado por los niveles de Landau,

$$\epsilon_n = \frac{\hbar e B}{m} (n + 1/2), \quad (\text{no relativistas}) \quad (2.16)$$

donde  $n$  denota a los números enteros no negativos,  $m$  es la masa del electrón y  $-e$  es la carga.

En cambio, el espectro energético de los electrones en el grafeno sometido a un campo magnético perpendicular es muy diferente. La presencia del campo se manifiesta por medio de la sustitución de Peierls (o sustitución mínima),  $\hbar \mathbf{q} \rightarrow \boldsymbol{\pi} = \hbar \mathbf{q} + e \mathbf{A}$ , en el hamiltoniano (2.11), donde el potencial vectorial  $\mathbf{A}$  es tal que  $\nabla \times \mathbf{A} = B \mathbf{e}_z$ . Luego, en analogía con el oscilador armónico unidimensional, se pueden introducir los operadores de creación y aniquilación,  $\hat{a}^\dagger$  y  $\hat{a}$ , en la forma  $\sqrt{2e\hbar B} \hat{a}^\dagger / \hat{a} = \pi_x \pm i\pi_y$ , tal que  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ . En términos de los operadores  $\hat{a}^\dagger$  y  $\hat{a}$ , el hamiltoniano de Dirac para los electrones en el grafeno bajo un campo magnético

uniforme resulta

$$H_\xi = \xi v_F \sqrt{2e\hbar B} \begin{pmatrix} 0 & \hat{a} \\ \hat{a}^\dagger & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

el cual se puede diagonalizar fácilmente si se toma su cuadrado,

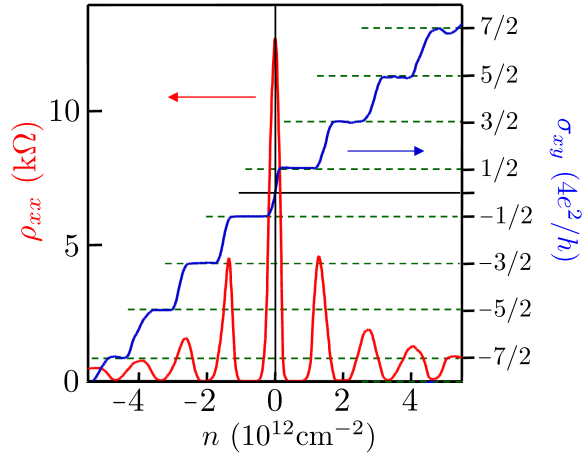
$$H_\xi^2 = v_F^2 2e\hbar B \begin{pmatrix} \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1 & 0 \\ 0 & \hat{a}^\dagger \hat{a} \end{pmatrix}. \quad (2.18)$$

De (2.18) se obtiene inmediatamente que los autovalores de (2.17) están dados por

$$\epsilon_n = \pm v_F \sqrt{2e\hbar B n}, \quad (\text{relativistas}) \quad (2.19)$$

donde el signo  $+$ ( $-$ ) corresponde a la banda de conducción (valencia). En el contexto de materia condensada, este espectro fue obtenido por primera vez por McClure [69] al desarrollar su teoría sobre el diamagnetismo del grafito.

**Figura 2.5:** Resistividad longitudinal  $\rho_{xx}$  y conductividad de Hall  $\sigma_{xy}$  del grafeno en función de la concentración de portadores, a una temperatura de 4 K y un campo magnético de 14 T. Las mesetas de  $\sigma_{xy}$  corresponden con los valores esperados,  $\pm(4e^2/h)(n + 1/2)$ , para fermiones relativistas sin masa no interactuantes. Adaptada de [6].



Los niveles relativistas de Landau (2.19) muestran dos diferencias fundamentales respecto a los usuales niveles de Landau (2.16). Primero, los niveles del espectro (2.19), a diferencia de (2.16), no son equidistantes. Esta característica es una consecuencia del espectro lineal en ausencia de campo magnético. Segundo, y más importante, (2.19) presenta un nivel de energía cero para  $n = 0$ , el cual tiene implicaciones relevantes en las propiedades de transporte del grafeno. La existencia de tales estados explica la ocurrencia de un efecto Hall cuántico semientero en el grafeno [6, 61]. A diferencia de los valores usuales para la conductividad de Hall, múltiplos enteros de

$\pm(4e^2/h)$ , en el grafeno los valores observados de la conductividad de Hall siguen la secuencia,  $\sigma_{xy} = \pm(4e^2/h)(n + 1/2)$ , como se observa en la Figura 2.5. Este corrimiento semientero está asociado al hecho de que el estado de energía cero tiene la mitad de la degeneración que tienen el resto de los niveles [70]. El efecto Hall cuántico semientero en el grafeno puede ser observado aún a temperatura ambiente [71], debido a que los niveles relativistas de Landua (2.19) siguen estando bien definidos para campos magnéticos típicos.

### 2.4.3. Absorción óptica universal

Otra propiedad sorprendente del grafeno es su respuesta óptica. Experimentalmente se ha observado que su coeficiente de absorción óptica  $\eta$  es independiente de la frecuencia de la luz incidente [15]. Aún más interesante resulta el hecho que su valor,  $\eta = \pi\alpha \approx 2.3\%$ , está expresado solo en términos de la constante de estructura fina  $\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c) \approx 1/137$ .

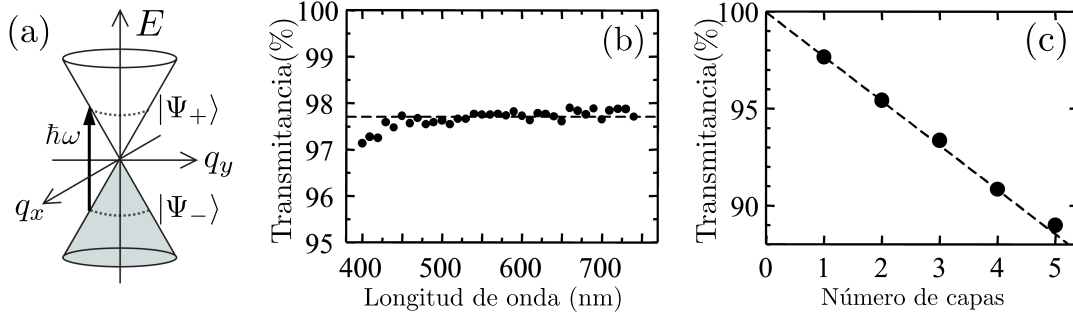
Este valor universal puede ser derivado fácilmente en la siguiente forma [72, 73]. Asumamos que el grafeno es irradiado perpendicularmente con una onda electromagnética plana cuyo campo eléctrico es  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \exp^{i(kz - \omega t)}$ . Por tanto, el flujo de energía incidente  $W_i$  resulta  $c\epsilon_0|\mathbf{E}_0|^2$ . Para calcular la absorción de energía por la muestra de grafeno, la interacción con la luz es modelada por el hamiltoniano

$$H = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\hbar \mathbf{q} + e \mathbf{A}), \quad (2.20)$$

donde el término  $ev_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} = (ev_F/i\omega) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E}$  será considerado como una perturbación. Tal interacción induce transiciones de un estado  $|\Psi_-\rangle$  de la banda de valencia a un estado  $|\Psi_+\rangle$  de la banda de conducción con el mismo vector de onda  $\mathbf{q}$ , pero con una ganancia  $\hbar\omega$  en energía (véase Figura 2.6 (a)). Entonces, usando la regla de oro de Fermi la energía absorbida por unidad de tiempo puede ser estimada como

$$W_a = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi_+ | (ev_F/i\omega) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E} | \Psi_- \rangle|^2 \rho_0(\hbar\omega/2) \hbar\omega. \quad (2.21)$$

Sustituyendo el valor de la densidad de estados  $\rho_0(\hbar\omega/2) = \hbar\omega/\pi\hbar^2v_F^2$  y promediando sobre los estados iniciales y finales, de (2.21) se obtiene que  $W_a = (e^2/4\hbar)|\mathbf{E}_0|^2$ , el cual no depende de  $v_F$ . En consecuencia, el coeficiente de absorción óptica del gra-



**Figura 2.6:** (a) Esquema de las transiciones ópticas. Los electrones de la banda de valencia son excitados a estados no ocupados de la banda de conducción conservando su momento y ganando  $\hbar\omega$  en energía. (b) Transmisión de una monocapa de grafeno en la región del espectro visible. La línea discontinua es el valor esperado ( $1 - \pi\alpha$ ). (c) Variación de la transmisión con el número de capas de grafeno. Adaptada de [15].

feno resulta

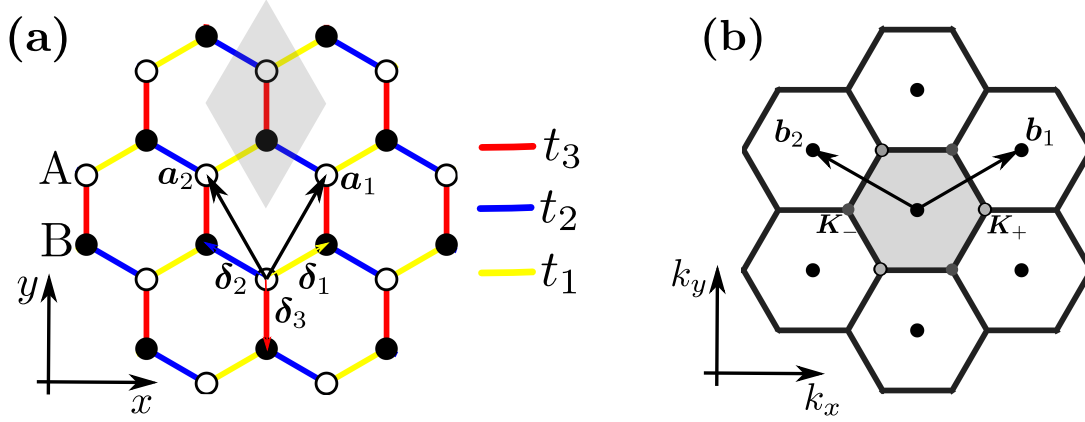
$$\eta = \frac{W_a}{W_i} = \frac{\pi e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \pi\alpha \approx 0.023, \quad (2.22)$$

que es el valor observado experimentalmente [15, 16]. De acuerdo con (2.22), el grafeno es muy transparente pues transmite el 97.7% de la luz, como es mostrado en la Figura 2.6 (b). Sin embargo, no ha de perderse de vista que un 2.3% de absorción por una monocapa es un valor muy elevado. Además, de (2.22) se puede concluir que la transmitancia de multicapas de grafeno es  $1 - N\pi\alpha$ , siendo  $N$  el número de capas. Esto es claramente demostrado por los datos experimentales que se ilustran en la Figura 2.6 (c).

## Grafeno deformado uniformemente: propiedades electrónicas

### 3.1. Red de panal anisotrópica

Con el propósito de estudiar más adelante las propiedades electrónicas del grafeno deformado uniformemente resulta conveniente considerar inicialmente un modelo de amarre fuerte anisotrópico sobre una red de panal. Concretamente, las integrales de salto a primeros vecinos son asumidas como dependientes de la dirección  $y$ , en general, serán caracterizadas como  $t_1$ ,  $t_2$  y  $t_3$ , según se ilustra en la Figura 3.1. Desde un punto de vista geométrico el problema considerado no tiene diferencias con el grafeno prístino, pero nos permite evaluar los efectos de las variaciones de las integrales de salto sobre las bandas  $\pi$ . Vale la pena añadir que este modelo generalizado tiene interés más allá del grafeno deformado. En la actualidad se crean sistemas bidimensionales que pueden describirse a partir del modelo planteado de una red de panal anisotrópica [74–76]. La ventaja principal de estos sistemas artificiales es que sus propiedades pueden ser muy bien sintonizadas, entre ellas, los saltos de las partículas entre diferentes sitios de la red. En consecuencia, tales especies de grafeno artificial ofrecen una plataforma más amplia que el grafeno deformado para observar efectos debidos a la anisotropía de las integrales de salto [77, 78].



**Figura 3.1:** (a) Esquema de una red de panal con anisotropía en las integrales de salto a primeros vecinos. Geométricamente es como el grafeno. (b) La red recíproca coincide con la del grafeno. La notación usada es la misma que en la Sección 2.1.

### 3.1.1. Relación de dispersión

El hamiltoniano de amarre fuerte para el modelo usado de red anisotrópica puede ser escrito como

$$H = - \sum_{\mathbf{R}_i} \sum_{n=1}^3 t_n (|A_{\mathbf{R}_i}\rangle \langle B_{\mathbf{R}_i+\delta_n}| + |B_{\mathbf{R}_i+\delta_n}\rangle \langle A_{\mathbf{R}_i}|), \quad (3.1)$$

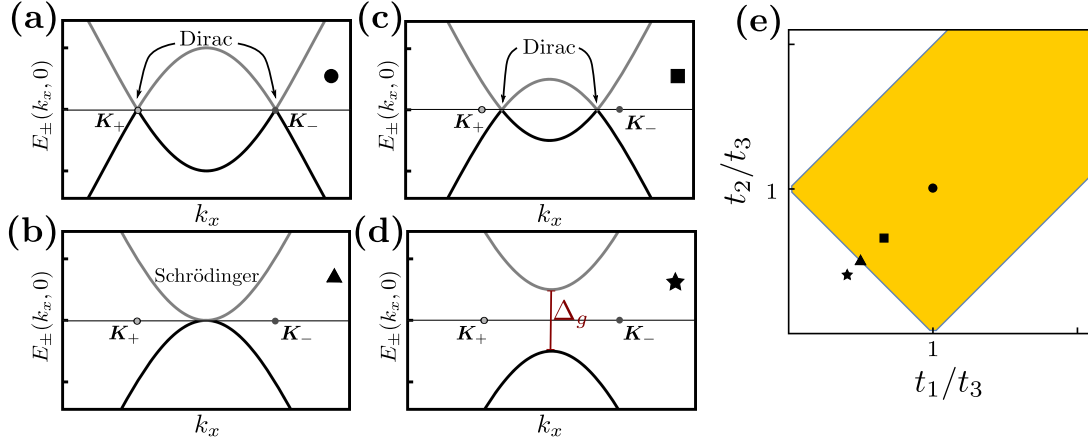
el cual se reduce a (2.4) para  $t_n = t$ . Como en el caso del grafeno prístino, las autofunciones de (3.1) pueden desarrollarse usando el mismo *ansatz* de Bloch (2.5). Entonces, despreciando el solapamiento entre orbitales de diferentes sitios, la ecuación de Schrödinger  $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$  toma la forma matricial

$$\begin{pmatrix} 0 & - \sum_{n=1}^3 t_n e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_n} \\ - \sum_{n=1}^3 t_n e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_n} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A(\mathbf{k}) \\ \Psi_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_A(\mathbf{k}) \\ \Psi_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

cuyos autovalores están dados por

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm |t_1 e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_1} + t_2 e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_2} + t_3 e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_3}|. \quad (3.3)$$





**Figura 3.2:** Relaciones de dispersión  $E_{\pm}(k_x, 0)$  a lo largo de  $k_y = 0$  para  $\gamma = 1$  (a),  $\gamma = 1.5$  (b),  $\gamma = 2$  (c) y  $\gamma = 2.5$  (d). En el panel (e), el área coloreada define los casos en los cuales el espectro (3.3) permanece sin brecha energética. Los cuatro puntos marcados corresponden con los ejemplos particulares de los paneles (a)-(d).

Discutamos algunas características relevantes de las relaciones de dispersión (3.3) y para ello asumamos que  $t_1 = t_2 = t$  y  $t_3 = \gamma t$ . Esta elección encuentra un ejemplo en el caso que el grafeno es deformado uniformemente en una de sus direcciones *zigzag* o *armchair* [26]. Entonces, si el parámetro  $\gamma$  toma los valores

- $\gamma = 1$ , el espectro (3.3) reproduce el caso del grafeno prístino (véase la Figura 3.2 (a)).
- $\gamma = 1.5$ , no hay brecha energética entre ambas bandas (3.3). Sin embargo, los conos de Dirac ya no están localizados en las esquinas de la primera zona de Brillouin, estos sufren un corrimiento (véase la Figura 3.2 (b)).
- ▲  $\gamma = 2$ , dos conos de Dirac de diferentes índices se funden. Ahora, el comportamiento a baja energía deja de ser lineal en la dirección  $q_x$  y se convierte en cuadrático. En consecuencia, aparece un comportamiento mixto: en la dirección  $q_y$  sigue siendo del tipo Dirac, pero en la dirección  $q_x$  es del tipo Schrödinger (véase la Figura 3.2 (c)).
- ★  $\gamma = 2.5$ , aparece una brecha energética  $\Delta$  entre la banda de conducción  $E_+$  y la banda de valencia  $E_-$  (véase la Figura 3.2 (d)). Para  $\gamma > 2$  la brecha está dada por  $\Delta = 2t(\gamma - 2)$ .

En general, el espectro (3.3) permanece sin brecha energética mientras se cumplan las desigualdades triangulares [79]:

$$\left| \frac{|t_1|}{|t_3|} - 1 \right| \leq \frac{|t_2|}{|t_3|} \leq \left| \frac{|t_1|}{|t_3|} + 1 \right|, \quad (3.4)$$

lo cual corresponde con el área coloreada en la Figura 3.2 (e).

### 3.1.2. Hamiltoniano efectivo de Dirac

Ahora obtendremos el hamiltoniano efectivo de Dirac para el caso de una ligera anisotropía dada por pequeñas perturbaciones de las integrales de salto en la forma

$$t_n = t(1 + \Delta_n), \quad (3.5)$$

tal que  $\Delta_n \ll 1$ . Esta condición garantiza que se cumplan las desigualdades de Hasegawa (3.4) y, por tanto, la existencia de conos de Dirac. Como fue visto en la sección anterior, y ampliamente demostrado en la literatura [26, 80], la anisotropía implica que los conos de Dirac ya no están localizados en las esquinas de la primera zona de Brillouin. En consecuencia, para derivar el hamiltoniano efectivo de Dirac no se debe hacer un desarrollo alrededor de  $\mathbf{K}_\pm$ , tal y como se ha hecho de manera errónea en la literatura. Este error ha sido discutido detalladamente por nosotros en [81]. El procedimiento correcto consiste en encontrar la posición de los puntos de Dirac y luego hacer el desarrollo alrededor de estos [80–83].

#### Corrimiento de los puntos de Dirac

La ecuación  $E(\mathbf{K}_D) = 0$ , que define la posición de los puntos de Dirac, según (3.3) puede ser simplemente escrita como

$$\sum_{n=1}^3 t_n e^{i\mathbf{K}_D \cdot \boldsymbol{\delta}_n} = 0. \quad (3.6)$$

Fijemos nuestra atención en el desplazamiento de un cono de Dirac particular, por ejemplo, el cono correspondiente a la esquina  $\mathbf{K}_+ = (\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0)$ . Entonces su posición

$\mathbf{K}_D^+$  se puede proponer en la forma

$$\mathbf{K}_D^+ = \mathbf{K}_+ + \mathbf{A} + \mathcal{O}(\Delta_n^2), \quad (3.7)$$

donde el corrimiento  $\mathbf{A}$  será buscado como una combinación lineal de los parámetros  $\{\Delta_n\}$ . Sustituyendo (3.7) en (3.6), y respetando el orden lineal, resulta

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^3 t(1 + \Delta_n) e^{i(\mathbf{K}_+ + \mathbf{A} + \mathcal{O}(\Delta_n^2)) \cdot \boldsymbol{\delta}_n} &= 0, \\ \sum_{n=1}^3 (1 + \Delta_n + i\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\delta}_n + \mathcal{O}(\Delta_n^2)) e^{i\mathbf{K}_+ \cdot \boldsymbol{\delta}_n} &= 0, \\ -3aA_x - \Delta_1 - \Delta_2 + 2\Delta_3 + i(-3aA_y + \sqrt{3}\Delta_1 - \sqrt{3}\Delta_2) + \mathcal{O}(\Delta_n^2) &= 0, \end{aligned}$$

de donde se obtiene que,

$$A_x = \frac{1}{3a}(2\Delta_3 - \Delta_1 - \Delta_2), \quad A_y = \frac{1}{\sqrt{3}a}(\Delta_1 - \Delta_2), \quad (3.8)$$

como nosotros reportamos en [84]. Por simple inspección puede verse que la expresión (3.8) se anula cuando  $\Delta_n = \Delta$ , lo cual es un resultado esperado. Nótese que en este caso la red permanece isotrópica, por lo tanto, los conos de Dirac siguen estando localizados en las esquinas de la primera zona de Brillouin.

Procediendo de manera análoga para el cono de Dirac correspondiente a la esquina  $\mathbf{K}_- = (-\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0)$  se puede demostrar que su corrimiento es igual a  $-\mathbf{A}$ . En general, conos de Dirac de diferentes índices de valle se corren en direcciones contrarias:

$$\mathbf{K}_D^\pm = \mathbf{K}_\pm \pm \mathbf{A} + \mathcal{O}(\Delta_n^2). \quad (3.9)$$

En el Capítulo 5, cuando discutamos el caso del grafeno bajo deformaciones no uniformes, veremos que esta propiedad tiene consecuencias importantes.

### Desarrollo alrededor de los puntos de Dirac

Una vez conocida la posición del punto de Dirac  $\mathbf{K}_D^+$ , entonces para obtener el hamiltoniano efectivo de Dirac debemos desarrollar el hamiltoniano de amarre fuerte

en el espacio- $\mathbf{k}$ ,

$$H = - \sum_{n=1}^3 t_n \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_n} \\ e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_n} & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

en la vecindad de  $\mathbf{K}_D^+$ , por medio de la sustitución  $\mathbf{k} = \mathbf{K}_D^+ + \mathbf{q}$ . Llevando a cabo tal desarrollo hasta primer orden en  $\mathbf{q}$  y en los parámetros  $\{\Delta_n\}$  se obtiene

$$\begin{aligned} H &= - \sum_{n=1}^3 t_n \begin{pmatrix} 0 & e^{-i(\mathbf{K}_+ + \mathbf{A} + \mathbf{q})\cdot\boldsymbol{\delta}_n} \\ e^{i(\mathbf{K}_+ + \mathbf{A} + \mathbf{q})\cdot\boldsymbol{\delta}_n} & 0 \end{pmatrix}, \\ &= - \sum_{n=1}^3 t(1 + \Delta_n) \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\mathbf{K}_+\cdot\boldsymbol{\delta}_n} \\ e^{i\mathbf{K}_+\cdot\boldsymbol{\delta}_n} & 0 \end{pmatrix} (\bar{\mathbf{I}} + i\sigma_z \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\delta}_n) (\bar{\mathbf{I}} + i\sigma_z \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\delta}_n), \\ &= -t \sum_{n=1}^3 \left( i \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\delta}_n}{a} \sigma_z \right) \left( \bar{\mathbf{I}} + i\sigma_z \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\delta}_n + i\sigma_z \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\delta}_n + \Delta_n \bar{\mathbf{I}} - (\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\delta}_n) (\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\delta}_n) \bar{\mathbf{I}} \right), \end{aligned} \quad (3.11)$$

donde  $\bar{\mathbf{I}}$  es la matriz identidad  $2 \times 2$ . Aquí se ha hecho uso de la igualdad [46]

$$\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\mathbf{K}_+\cdot\boldsymbol{\delta}_n} \\ e^{i\mathbf{K}_+\cdot\boldsymbol{\delta}_n} & 0 \end{pmatrix} = i \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\delta}_n}{a} \sigma_z. \quad (3.12)$$

Explícitamente, cada término de la expresión (3.11) se reduce a

$$-t \sum_{n=1}^3 \left( i \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\delta}_n}{a} \sigma_z \right) = 0, \quad (3.13)$$

$$-t \sum_{n=1}^3 \left( i \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\delta}_n}{a} \sigma_z \right) (i\sigma_z \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\delta}_n) = \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q}, \quad (3.14)$$

$$-t \sum_{n=1}^3 \left( i \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\delta}_n}{a} \sigma_z \right) (i\sigma_z \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\delta}_n) = \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}, \quad (3.15)$$

$$-t \sum_{n=1}^3 \left( i \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\delta}_n}{a} \sigma_z \right) \Delta_n = -\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}, \quad (3.16)$$

$$t \sum_{n=1}^3 \left( i \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\delta}_n}{a} \sigma_z \right) (\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\delta}_n) (\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\delta}_n) = \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \bar{\boldsymbol{\Delta}} \cdot \mathbf{q}, \quad (3.17)$$

donde la matriz simétrica  $\bar{\Delta}$  está dada por

$$\bar{\Delta} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3}(2\Delta_1 + 2\Delta_2 - \Delta_3) & \frac{1}{\sqrt{3}}(\Delta_1 - \Delta_2) \\ \frac{1}{\sqrt{3}}(\Delta_1 - \Delta_2) & \Delta_3 \end{pmatrix}. \quad (3.18)$$

Es importante señalar que la expresión (3.18) de la matriz  $\bar{\Delta}$  es referida al sistema coordenado  $xy$ , cuyo eje  $x$  es tomado en la dirección *zigzag* del grafeno. En general, si es seleccionado un sistema coordenado arbitrario  $x'y'$ , rotado un ángulo  $\phi$  respecto al sistema  $xy$ , entonces las nuevas componentes de  $\bar{\Delta}$  pueden ser encontradas por medio de las reglas de transformación de un tensor cartesiano de segundo orden. En otras palabras,  $\bar{\Delta}$  es un tensor cartesiano de segundo orden, cuya forma explícita (3.18) es dada respecto al sistema coordenado  $xy$ .

Finalmente, tomando en cuenta la contribución de cada uno de los términos (3.13-3.17), el hamiltoniano efectivo de Dirac de la red anisotrópica, alrededor de  $K_D^+$ , tiene la forma [84]

$$H = \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\Delta}) \cdot \mathbf{q} \quad (3.19)$$

donde  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$  es un vector de matrices de Pauli y  $\mathbf{q} = -i\nabla$ . Puede demostrarse que el hamiltoniano efectivo de Dirac alrededor de  $K_D^-$  es análogo a (3.19), basta reemplazar  $\boldsymbol{\sigma}$  con  $\boldsymbol{\sigma}^* = (-\sigma_x, \sigma_y)$ .

Como prueba de la consistencia de nuestro hamiltoniano generalizado (3.19), consideremos nuevamente el caso particular en que las tres integrales de salto son igualmente perturbadas como  $t_n = t(1+\Delta)$ . Entonces, de (3.18) se tiene que  $\bar{\Delta} = \Delta\bar{\mathbf{I}}$  y, en consecuencia, (3.19) reproduce el resultado esperado  $\hbar v_F(1+\Delta)\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q}$ . Sin necesidad de hacer ningún cálculo, se puede llegar a la conclusión que el hamiltoniano de Dirac en este caso es  $\hbar v_F(1+\Delta)\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q}$ . Nótese que únicamente se está renormalizando el valor de la integral de salto de  $t$  a  $t(1+\Delta)$  y, por tanto, el nuevo valor de la velocidad de Fermi es  $v_F(1+\Delta)$ . En general, de (3.4) se puede reconocer como velocidad generalizada de Fermi al tensor

$$\bar{\mathbf{v}} = v_F(\bar{\mathbf{I}} + \bar{\Delta}), \quad (3.20)$$

cuyo carácter matricial es debido a la forma elíptica de las curvas isoenergéticas de los conos de Dirac. Téngase en cuenta que debido a la anisotropía las curvas

isoenergéticas ya no son círculos sino elipses. Solamente para el caso en que  $t_1 = t_2$  ( $\Delta_1 = \Delta_2$ ), el tensor velocidad de Fermi (3.20) es diagonal con respecto al sistema coordenado  $xy$ . En este caso, los ejes principales de las elipses isoenergéticas son colineales con los ejes  $xy$ .

A modo de conclusión parcial, enfatizamos el carácter general de nuestro hamiltoniano (3.19). El hecho de haber trabajado con una variación arbitraria de las integrales de salto permitirá obtener de manera fácil el hamiltoniano efectivo de Dirac cuando tal variación de las integrales de salto sea modelada de una forma específica. En la próxima sección, este resultado será aplicado al caso del grafeno bajo una deformación uniforme.

## 3.2. Deformaciones uniformes del grafeno

Consideremos ahora que la red del grafeno está deformada uniformemente en su mismo plano. Bajo esta deformación, si  $\mathbf{a}$  representaba un vector general de la red no deformada, entonces su contraparte deformada está dada por la transformación

$$\mathbf{a}' = (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}}) \cdot \mathbf{a}, \quad (3.21)$$

donde el tensor de deformaciones  $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}$  tiene la forma general simétrica

$$\bar{\boldsymbol{\epsilon}} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} \\ \epsilon_{xy} & \epsilon_{yy} \end{pmatrix}.$$

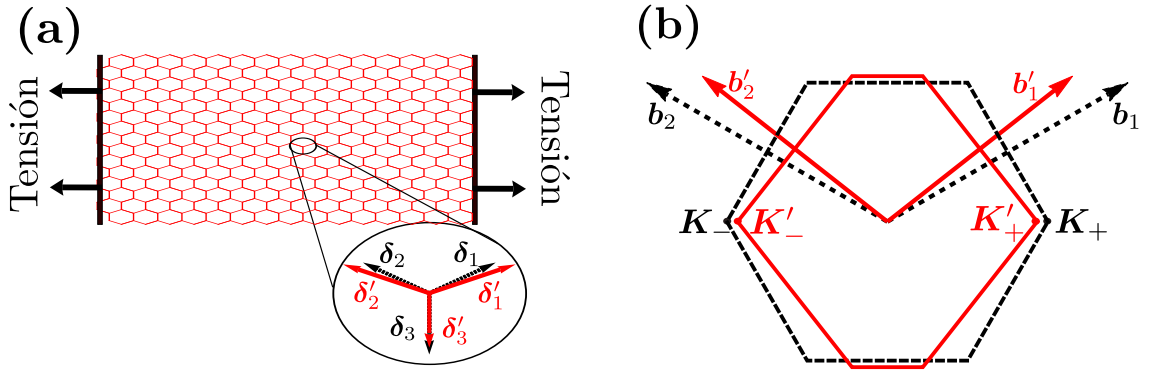
Dado que la deformación asumida es uniforme, las componentes de  $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}$  no dependen de la posición. Como ejemplo podemos citar el caso de los vectores a los tres primeros vecinos cuyas expresiones deformadas son  $\boldsymbol{\delta}'_n = (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}}) \cdot \boldsymbol{\delta}_n$ . En la Figura 3.3 (a) se muestra esquemáticamente la transformación de los vectores a los tres primeros vecinos en el caso de una deformación uniaxial a lo largo de la dirección *zigzag* de la muestra del grafeno.

Al mismo tiempo, una deformación uniforme (del espacio directo) produce una distorsión uniforme del espacio recíproco. De (3.21) se deduce que si  $\mathbf{b}$  representa un vector del espacio recíproco no deformado, su contraparte deformada resulta

$\mathbf{b}' = (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}})^{-1} \cdot \mathbf{b}$  (véase la Figura 3.3 (b)). Sin embargo, los puntos de alta simetría de la primera zona de Brillouin no son modificados según esta transformación,  $\mathbf{K}'_{\pm} \neq (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}})^{-1} \cdot \mathbf{K}_{\pm}$ . Es importante notar que tales puntos de alta simetría no están definidos por vectores del espacio recíproco, sino por la construcción de la celda de Wigner-Seitz. Por ejemplo, las esquinas  $\mathbf{K}_{\pm} = (\pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0)$  de la zona de Brillouin no deformada, bajo una pequeña deformación uniforme, se mueven a las nuevas posiciones

$$\mathbf{K}'_{\pm} \simeq \pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} (1 - \bar{\epsilon}_{xx}/2 - \bar{\epsilon}_{yy}/2, -2\bar{\epsilon}_{xy}), \quad (3.22)$$

y no a los puntos  $\pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} (1 - \bar{\epsilon}_{xx}, -\bar{\epsilon}_{xy})$ , como erróneamente pudiera pensarse. Expresiones generales de las nuevas posiciones de las esquinas de la primera zona de Brillouin deformada pueden encontrarse en [85].



**Figura 3.3:** (a) Esquema de una deformación uniaxial y uniforme del grafeno a lo largo de su dirección *zigzag*. La ampliación muestra la transformación de los vectores a los tres primeros vecinos  $\boldsymbol{\delta}_i$ , no deformados, en los vectores  $\boldsymbol{\delta}'_i$  de la red deformada. (b) En negro se ilustra la primera zona de Brillouin para el caso del grafeno prístino. En contraparte, en rojo se muestra la primera zona de Brillouin bajo la deformación uniforme. Nótese cómo el espacio recíproco se contrae en la dirección en que la red (espacio directo) es estirada.

### 3.2.1. Relación de dispersión

Dentro de la aproximación de amarre fuerte a primeros vecinos, el hamiltoniano del grafeno deformado uniformemente quedaría dado por,

$$H = - \sum_{\mathbf{R}'_i} \sum_{n=1}^3 t_n (|A_{\mathbf{R}'_i}\rangle \langle B_{\mathbf{R}'_i+\delta'_n}| + |B_{\mathbf{R}'_i+\delta'_n}\rangle \langle A_{\mathbf{R}'_i}|), \quad (3.23)$$

donde  $\mathbf{R}'_i$  suma sobre todos los sitios de la subred deformada A. Nótese que, como producto de la deformación de la red, la distancia entre átomos de carbono cambia, lo cual conlleva a diferentes integrales de salto  $t_n$  entre sitios vecinos. Aquí la dependencia de las integrales de salto, como función de la distancia entre sitios vecinos, es expresada por medio del decaimiento exponencial [26, 86]

$$t_n = t \exp[-\beta(|\delta'_n|/a - 1)], \quad (3.24)$$

con  $\beta = 3.37$ . Aunque la dependencia (3.24) es la más comúnmente usada en la literatura, la variación de las integrales de salto también ha sido evaluada por medio de la ley de Harrison  $t_n = t(a/|\delta'_n|)^2$ , empleada para calcular la estructura de bandas de nanoláminas (*nanoribbons*) de grafeno deformado [87, 88].

Si de manera análoga al caso del grafeno prístino, las autofunciones de (3.23) se desarrollan usando el *ansatz* de Bloch:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{R}'_j} (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}'_j} \Psi_A(\mathbf{k}) |A_{\mathbf{R}'_j}\rangle + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}'_j+\delta'_3)} \Psi_B(\mathbf{k}) |B_{\mathbf{R}'_j+\delta'_3}\rangle), \quad (3.25)$$

y se desprecia el solapamiento entre orbitales de diferentes sitios, la ecuación de Schrödinger  $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$  se convierte en el problema de autovalores

$$\begin{pmatrix} 0 & -\sum_{n=1}^3 t_n e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta'_n} \\ -\sum_{n=1}^3 t_n e^{i\mathbf{k}\cdot\delta'_n} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A(\mathbf{k}) \\ \Psi_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_A(\mathbf{k}) \\ \Psi_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Inmediatamente de (3.26) se obtiene que la relación de dispersión (bandas  $\pi$ ) del



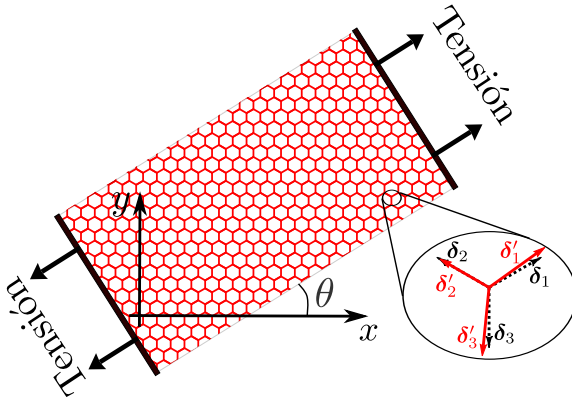
grafeno deformado uniformemente está dada por

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm |t_1 e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta'_1} + t_2 e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta'_2} + t_3 e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta'_3}|, \quad (3.27)$$

la cual es una función del tensor de deformaciones  $\epsilon$ . Téngase presente que las integrales de salto son expresadas según (3.24), mientras los vectores a primeros vecinos de la red deformada son  $\delta'_n = (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\epsilon}) \cdot \delta_n$ .

### Deformación uniaxial

En aras de evaluar los efectos de las deformaciones uniformes sobre la relación de dispersión (3.27), consideremos que el grafeno es sometido a una deformación uniaxial a lo largo de una dirección que forma un ángulo  $\theta$  respecto a su dirección *zigzag*, como es ilustrado en la Figura 3.4.



**Figura 3.4:** Esquema de una deformación uniaxial y uniforme del grafeno en una dirección arbitraria, la cual forma un ángulo  $\theta$  respecto a la dirección cristalográfica *zigzag*.

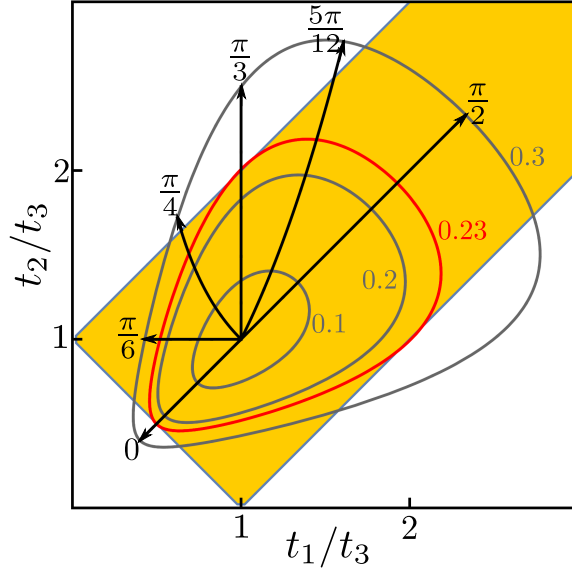
En la situación descrita, el tensor de deformaciones tiene la forma explícita

$$\bar{\epsilon} = \epsilon \begin{pmatrix} \cos^2 \theta - \nu \sin^2 \theta & (1 + \nu) \cos \theta \sin \theta \\ (1 + \nu) \cos \theta \sin \theta & \sin^2 \theta - \nu \cos^2 \theta \end{pmatrix}, \quad (3.28)$$

respecto al sistema cristalino  $xy$ . El coeficiente de Poisson  $\nu$  del grafeno es muy pequeño,  $\nu \sim 0.1$ , de acuerdo con estimaciones teóricas y experimentales [10, 89]. Por su parte, la magnitud de la deformación  $\epsilon$  es un parámetro que puede ser controlado externamente [25, 90, 91].

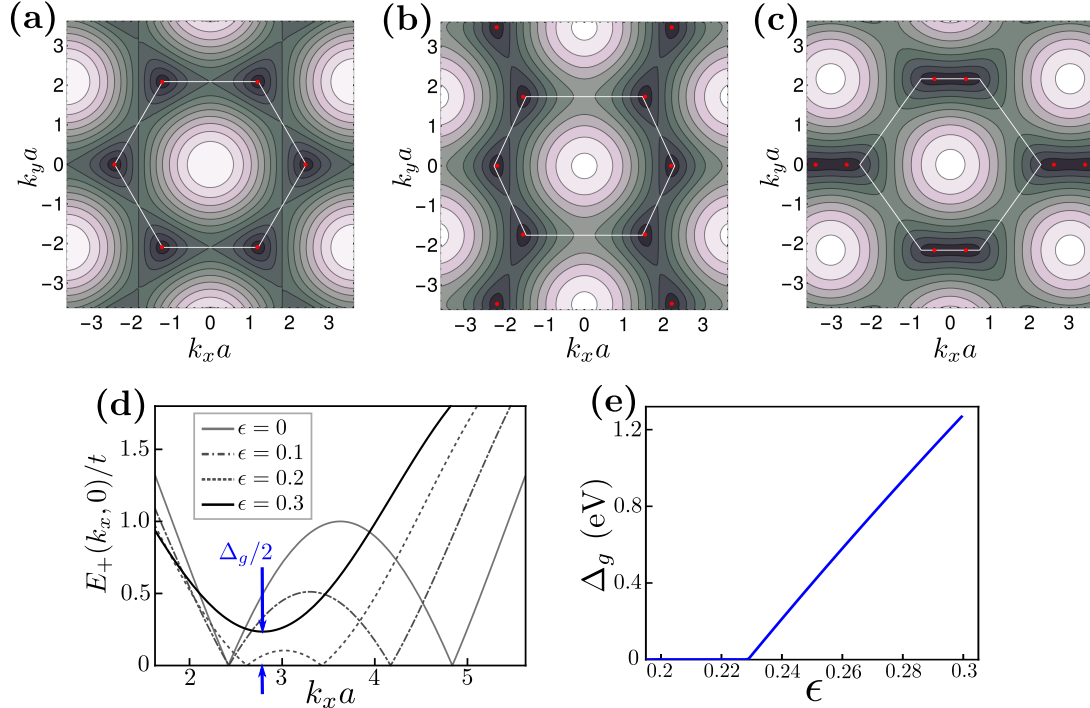
Una pregunta inminente surge. ¿Bajo cuál deformación uniaxial aparece una brecha energética en (3.27)?

**Figura 3.5:** Las curvas negras corresponden a la trayectoria del punto  $(t_1/t_3, t_2/t_3)$  cuando  $\epsilon$  aumenta y  $\theta$  tiene un valor fijo. En cambio, las curvas cerradas corresponden con un valor fijo de  $\epsilon$ , y  $\theta$  variando desde 0 a  $2\pi$ . El área coloreada define el conjunto de pares  $(t_1/t_3, t_2/t_3)$  para los cuales el espectro (3.27) permanece sin brecha energética. Inspirada en [26].



Usando (3.21), (3.24) y (3.28), podemos identificar los valores de  $\epsilon$  y  $\theta$  para los cuales los cocientes  $t_1/t_3$  y  $t_2/t_3$  violan las desigualdades de Hasegawa (3.4). Más específicamente, para un valor fijo de  $\theta$ , se puede seguir la trayectoria del par  $(t_1/t_3, t_2/t_3)$  como función de la magnitud  $\epsilon$ . En la Figura 3.5 se observa cómo al aumentar  $\epsilon$ , desde el estado no deformado  $\epsilon = 0$ , la trayectoria sale del área coloreada. El valor de  $\epsilon$  para el cual  $(t_1/t_3, t_2/t_3)$  se localiza en la frontera del área coloreada corresponde a la magnitud mínima necesaria de la deformación uniaxial, en la dirección particular  $\theta$ , para lograr una brecha energética. Según este procedimiento, mostrado en la Figura 3.5, se llega a las siguientes conclusiones [26]:

- i) El comportamiento frente a la deformación uniaxial es periódico en  $\theta$ , con periodo  $\pi/3$ , en concordancia con la simetría de la red del grafeno.
- ii) Dentro de las deformaciones uniaxiales, la más eficiente para generar una brecha energética en la estructura de bandas del grafeno es aquella que se aplica en su dirección *zigzag* ( $\theta = 0, \pi/3, 2\pi/3$ ). El estiramiento mínimo es del 23% ( $\epsilon = 0.23$ ).
- iii) Una deformación uniaxial a lo largo de la dirección *armchair* ( $\theta = \pi/6, \pi/2, 5\pi/6$ ) nunca genera una brecha energética.



**Figura 3.6:** Los paneles superiores muestran gráficos de contorno de la relación de dispersión (3.27) para  $(\epsilon = 0)$  (a),  $(\epsilon = 0.2, \theta = \pi/2)$  (b) y  $(\epsilon = 0.2, \theta = 0)$  (c). En cada caso, la primera zona de Brillouin es delimitada por una línea poligonal blanca. Los puntos rojos marcan la ubicación de los puntos de Dirac. En el panel (d) se grafica  $E_+(k_x, 0)$  para diferentes valores de  $\epsilon$  y  $\theta = 0$ , pudiendo apreciarse el acercamiento de los conos de Dirac a medida que  $\epsilon$  aumenta, hasta que finalmente aparece una brecha energética  $\Delta_g$ . En (e) aparece la dependencia de  $\Delta_g$  como función de  $\epsilon$ . Inspirada en [26].

Como fue discutido anteriormente, la aparición de una brecha es el resultado de que dos conos de Dirac se fundan. En el caso de una deformación uniaxial en la dirección *armchair*, los conos de Dirac no equivalentes se mueven en direcciones opuestas y nunca se encuentran (véase Figura 3.6 (b)). En contraste, a medida que la magnitud de una deformación en la dirección *zigzag* aumenta, conos no equivalentes de Dirac se aproximan (Figura 3.6 (c)) hasta que terminan uniéndose. Este proceso de fusión es presentado con detalle en la Figura 3.6 (d), donde se observa la aparición de la brecha para deformaciones más allá del 23%. Justo para este valor crítico se tiene un comportamiento mixto Dirac-Schrödinger, pues la relación de dispersión es lineal en la dirección  $k_x$  y cuadrática en la dirección  $k_y$ . En la Figura 3.6 (e) se

evidencia la dependencia explícita de la brecha energética  $\Delta_g$  como función de la magnitud  $\epsilon$  de la deformación uniaxial. Resultados cuantitativamente similares han sido obtenidos a partir de cálculos de primeros principios [92].

### 3.2.2. Hamiltoniano efectivo de Dirac

Ahora derivemos el hamiltoniano efectivo de Dirac para el grafeno bajo una ligera deformación uniforme, tal que  $|\bar{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\delta}_n| \ll a$ . La metodología a seguir será como la discutida en la Sección 3.1.2. Primero se deben encontrar las posiciones de los puntos de Dirac y luego desarrollar el hamiltoniano de amarre (escrito en el espacio- $\mathbf{k}$ ) alrededor de estos puntos. Tales cálculos aparecen explícitamente en nuestra publicación [80], donde fue reportado el hamiltoniano efectivo de Dirac. Aquí se presentará una derivación alternativa para mostrar la generalidad de los resultados de la Sección 3.1.2.

Tomando en cuenta la consideración  $|\bar{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\delta}_n| \ll a$ , las integrales de salto pueden ser aproximadas como

$$t_n \simeq t \left( 1 - \frac{\beta}{a^2} \boldsymbol{\delta}_n \cdot \bar{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\delta}_n \right), \quad (3.29)$$

que se obtiene al desarrollar (3.24) a primer orden en el tensor de deformaciones  $\bar{\epsilon}$ . En lo sucesivo, este será el orden respetado en la derivación de los resultados subsecuentes.

Por simple inspección se puede reconocer que el término  $-\frac{\beta}{a^2} \boldsymbol{\delta}_n \cdot \bar{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\delta}_n$  en (3.29) es un caso particular de las perturbaciones arbitrarias  $\Delta_n$  en (3.5). Sin embargo, antes de tomar ventaja de los resultados generales de la Sección 3.1.2 se debe tener presente un detalle importante. En la Sección 3.1.2 únicamente se consideró la variación de las integrales de salto, mientras la red permaneció sin deformarse. En el caso que ahora nos ocupa sí se tiene en cuenta la deformación de la red del grafeno. No obstante, esta diferencia se salva al introducir la nueva cantidad

$$\mathbf{k}^* = (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\epsilon})^\top \cdot \mathbf{k} = (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\epsilon}) \cdot \mathbf{k}. \quad (3.30)$$

Trabajar en el espacio  $\mathbf{k}^*$  es como si la red del grafeno no se hubiera deformado, lo que facilita la analogía con la Sección 3.1.2. Por ejemplo, la relación de dispersión

(3.27) del grafeno deformado uniformemente, puede ser reescrita en la forma

$$\begin{aligned}
E_{\pm}(\mathbf{k}^*) &= \pm |t_1 e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}'_1} + t_2 e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}'_2} + t_3 e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}'_3}|, \\
&= \pm |t_1 e^{-i\mathbf{k} \cdot (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}}) \cdot \boldsymbol{\delta}_1} + t_2 e^{-i\mathbf{k} \cdot (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}}) \cdot \boldsymbol{\delta}_2} + t_3 e^{-i\mathbf{k} \cdot (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}}) \cdot \boldsymbol{\delta}_3}|, \\
&= \pm |t_1 e^{-i\mathbf{k}^* \cdot \boldsymbol{\delta}_1} + t_2 e^{-i\mathbf{k}^* \cdot \boldsymbol{\delta}_2} + t_3 e^{-i\mathbf{k}^* \cdot \boldsymbol{\delta}_3}|,
\end{aligned} \tag{3.31}$$

la cual coincide formalmente con la relación de dispersión (3.3).

Según este análisis, los resultados de la Sección 3.1.2 son directamente aplicables al caso del grafeno bajo una pequeña deformación uniforme si se hacen las sustituciones

$$\Delta_n \rightarrow -\frac{\beta}{a^2} \boldsymbol{\delta}_n \cdot \bar{\boldsymbol{\epsilon}} \cdot \boldsymbol{\delta}_n, \tag{3.32}$$

$$\mathbf{k} \rightarrow (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}}) \cdot \mathbf{k}. \tag{3.33}$$

En consecuencia, a partir de (3.9) y (3.33) se obtiene que las posiciones de los puntos de Dirac  $\mathbf{K}_D^{\pm}$ , a primer orden en  $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}$ , están dadas por

$$\begin{aligned}
(\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}}) \cdot \mathbf{K}_D^{\pm} &= \mathbf{K}_{\pm} \pm \mathbf{A} + \mathcal{O}(\bar{\epsilon}_{ij}^2), \\
\mathbf{K}_D^{\pm} &\approx (\bar{\mathbf{I}} - \bar{\boldsymbol{\epsilon}}) \cdot \mathbf{K}_{\pm} \pm \mathbf{A},
\end{aligned} \tag{3.34}$$

donde

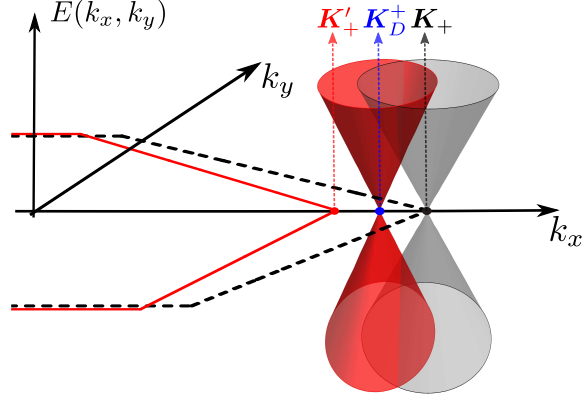
$$A_x = \frac{\beta}{2a} (\bar{\epsilon}_{xx} - \bar{\epsilon}_{yy}), \quad A_y = -\frac{\beta}{2a} (2\bar{\epsilon}_{xy}), \tag{3.35}$$

de acuerdo con (3.8) y (3.32). Debido a que la expresión (3.8) es referida al sistema cristalino  $xy$ , la expresión para el corrimiento  $\mathbf{A}$  también lo es.

Si comparamos (3.34) con (3.22) claramente se observa que los puntos de Dirac  $\mathbf{K}_D^{\pm}$  no coinciden con las esquinas  $\mathbf{K}'_{\pm}$  de la primera zona de Brillouin deformada, hecho que es representado esquemáticamente en la Figura 3.7. Incluso, en el caso hipotético que las integrales de salto no variasen ( $\mathbf{A} = 0$ ) y solo se tuviera en cuenta la deformación de la red, entonces  $\mathbf{K}_D^{\pm} \simeq (\bar{\mathbf{I}} - \bar{\boldsymbol{\epsilon}}) \cdot \mathbf{K}_{\pm}$ , expresión que tampoco coincide con (3.22).

Siguiendo la idea recién empleada para determinar el corrimiento de los conos de Dirac, el hamiltoniano efectivo de Dirac puede ser fácilmente derivado. De (3.32)

**Figura 3.7:** Esquema del corrimiento del cono de Dirac (cono rojo) cuando el grafeno es sometido a una deformación uniaxial y uniforme a lo largo de su dirección *zigzag*. El cono de Dirac gris es la imagen del cono de Dirac rojo cuando el grafeno no está deformado.



y (3.18), se obtiene que la matriz  $\bar{\Delta}$ , definida en la Sección 3.1.2, adquiere la forma particular  $\bar{\Delta} = -\beta\bar{\epsilon}$ . Consecuentemente, de (3.33) y (3.19) se llega de manera inmediata al hamiltoniano efectivo [80]

$$H = \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}} - \beta\bar{\boldsymbol{\epsilon}}) \cdot \mathbf{q} \quad (3.36)$$

en la vecindad del punto de Dirac  $\mathbf{K}_D^+$ .

En (3.36) pueden ser reconocidas dos contribuciones debidas a la deformación del grafeno. El término  $\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \bar{\boldsymbol{\epsilon}} \cdot \mathbf{q}$ , independiente de  $\beta$ , es puramente una consecuencia geométrica de la distorsión de la red y no depende de las propiedades del material, más allá de su propia topología. En cambio, el término  $-\hbar v_F \beta \boldsymbol{\sigma} \cdot \bar{\boldsymbol{\epsilon}} \cdot \mathbf{q}$ , producto de los cambios en las integrales de salto, sí depende del material puesto que  $\beta$  varía según sea este. Para el grafeno ambas contribuciones son del mismo orden, pues  $\beta \sim 3$ .

Finalmente, de (3.36) puede ser identificada como velocidad generalizada de Fermi el tensor [80]

$$\bar{\mathbf{v}} = v_F (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}} - \beta\bar{\boldsymbol{\epsilon}}) \quad (3.37)$$

para el caso de una ligera deformación uniforme. En la literatura pueden encontrarse expresiones diferentes a (3.37) para esta importante magnitud. Entre las más citadas aparece

$$\bar{\mathbf{v}} = v_F \left( \bar{\mathbf{I}} - \frac{\beta}{4} (2\bar{\boldsymbol{\epsilon}} + \text{Tr}(\bar{\boldsymbol{\epsilon}})\bar{\mathbf{I}}) \right), \quad (3.38)$$

véase la ecuación (21) en [46]. Mostremos a través de una prueba de consistencia

muy simple que esta última expresión no es correcta. Supongamos que el grafeno es sometido a un estiramiento (o compresión) isotrópico, el cual es descrito por  $\bar{\epsilon} = \epsilon \bar{\mathbf{I}}$ . Esta deformación es justo una renormalización de la distancia entre los átomos de carbono. Como resultado, la nueva distancia entre átomos vecinos es  $a' = a(1 + \epsilon)$ . Al mismo tiempo, el nuevo parámetro de salto, a primer orden en la magnitud  $\epsilon$ , es  $t' = t(1 - \beta\epsilon)$ . Por tanto, la nueva velocidad de Fermi, que se obtiene directamente desde la aproximación de amarre fuerte, es  $v'_F = 3t'a'/2\hbar \simeq v_F(1 - \beta\epsilon + \epsilon)$ . Si sustituimos  $\bar{\epsilon} = \epsilon \bar{\mathbf{I}}$  en nuestra expresión (3.37) se obtiene claramente este resultado. Sin embargo, bajo la deformación isotrópica considerada, la ecuación (3.38) arroja el resultado erróneo  $v_F(1 - \beta\epsilon)$  para la velocidad de Fermi. Este simple test demuestra que (3.38) no captura de manera apropiada la anisotropía inducida por la deformación. La causa de este error radica en un detalle clave: la expresión (3.38) fue deducida a partir de un desarrollo alrededor de  $\mathbf{K}_+$ , y no en la vecindad del punto de Dirac  $\mathbf{K}_D^+$ , como sí se hizo para deducir (3.37).

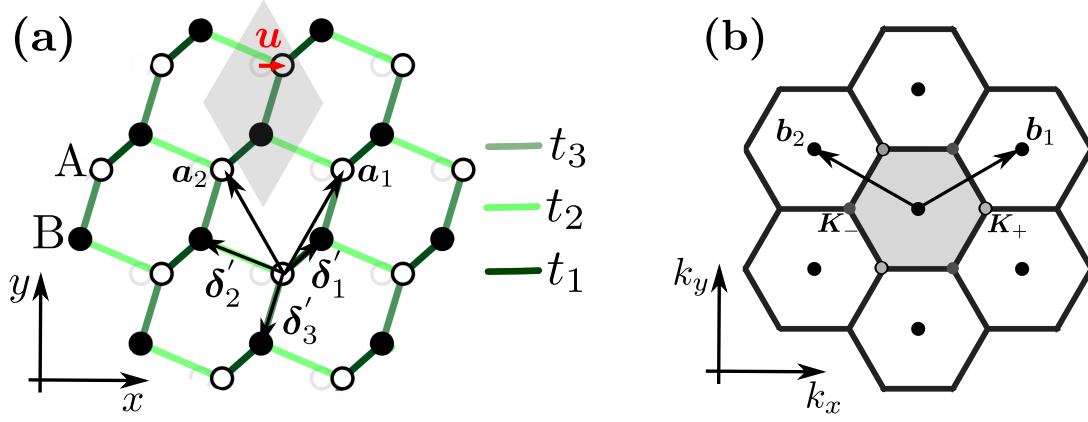
### 3.3. Una distorsión uniforme (no mecánica) del grafeno

Como otra aplicación de los resultados obtenidos en la Sección 3.1, consideremos una distorsión estructural de la red del grafeno como se ilustra en la Figura 3.8 (a). Aquí los vectores base  $\mathbf{a}_1$  y  $\mathbf{a}_2$  no se deforman, mientras el átomo de la base, denotado por un círculo blanco, es desplazado un vector arbitrario  $\mathbf{u} = u(\cos\theta, \sin\theta)$ . La distorsión considerada puede pensarse como un desplazamiento  $\mathbf{u}$  de la subred A (círculos blancos) respecto a la subred B (círculos negros). Un posible escenario para esta distorsión pudiera ocurrir en el caso que el grafeno sea crecido sobre un sustrato con una determinada desalineación de constante de red entre ambos cristales [93, 94].

En la Figura 3.8 (a) puede observarse que los nuevos vectores a los tres primeros vecinos  $\delta'_n$  están relacionados con sus contrapartes no deformadas  $\delta_n$  por medio de

$$\delta'_n = \delta_n - \mathbf{u}. \quad (3.39)$$

Sin embargo, debe notarse que la red recíproca no se modifica ya que los vectores



**Figura 3.8:** (a) Esquema de la distorsión estructural de la red del grafeno. La flecha roja representa el desplazamiento  $\mathbf{u}$  de la subred A respecto a la subred B. (b) La red recíproca coincide con la del grafeno prístino.

base,  $\mathbf{a}_1$  y  $\mathbf{a}_2$ , no se distorsionan (véase la Figura 3.8 (b)). Este hecho es una diferencia notable respecto a las deformaciones uniformes consideradas en la sección anterior, donde los vectores base se deformaban según (3.21).

### 3.3.1. Relación de dispersión

Como en las secciones anteriores, partiendo de un modelo de amarre fuerte a primeros vecinos, es fácil demostrar que la relación de dispersión (bandas  $\pi$ ) para este caso está dada por

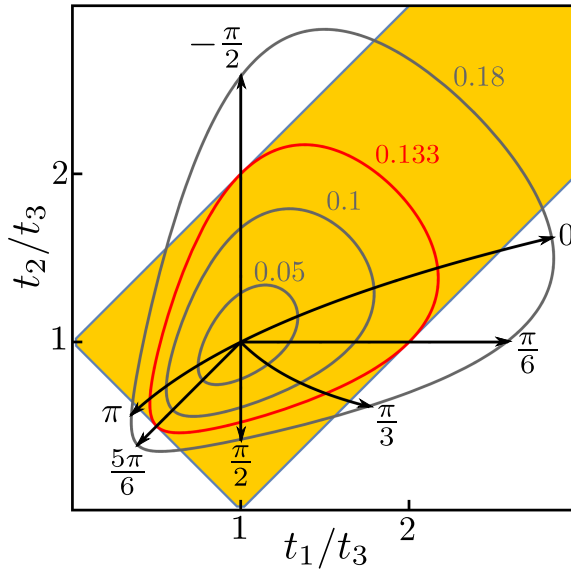
$$\begin{aligned}
 E(\mathbf{k}) &= \pm |t_1 e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}'_1} + t_2 e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}'_2} + t_3 e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}'_3}|, \\
 &= \pm |t_1 e^{i\mathbf{k}\cdot(\boldsymbol{\delta}_1 - \mathbf{u})} + t_2 e^{i\mathbf{k}\cdot(\boldsymbol{\delta}_2 - \mathbf{u})} + t_3 e^{i\mathbf{k}\cdot(\boldsymbol{\delta}_3 - \mathbf{u})}|, \\
 &= \pm |t_1 e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_1} + t_2 e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_2} + t_3 e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_3}|,
 \end{aligned} \tag{3.40}$$

donde las integrales de salto son caracterizadas por la ley (3.24),

$$\begin{aligned}
 t_n &= t \exp[-\beta(|\boldsymbol{\delta}'_n|/a - 1)], \\
 &= t \exp[-\beta(|\boldsymbol{\delta}_n - \mathbf{u}|/a - 1)],
 \end{aligned} \tag{3.41}$$

con  $\beta = 3.37$ .





**Figura 3.9:** Las curvas negras corresponden a la trayectoria del punto  $(t_1/t_3, t_2/t_3)$  cuando  $u$  aumenta y  $\theta$  tiene un valor fijo. En cambio, las curvas cerradas corresponden con un valor fijo de  $u$ , y  $\theta$  variando desde  $0$  a  $2\pi$ . El área coloreada define el conjunto de pares  $(t_1/t_3, t_2/t_3)$  para los cuales el espectro (3.40) permanece sin brecha energética.

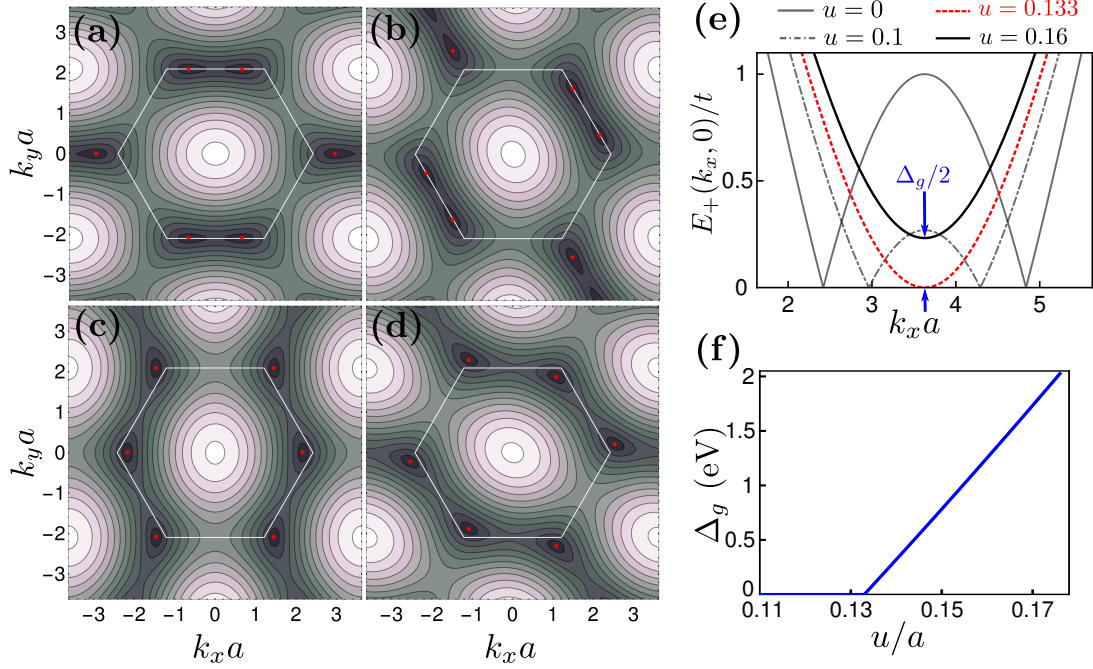
Para responder a la pregunta ¿bajo cuál distorsión aparece una brecha energética en (3.40)?, podemos proceder análogamente a la Sección 3.2.1.

Usando (3.41) podemos identificar los valores de  $u$  y  $\theta$  para los cuales los cocientes  $t_1/t_3$  y  $t_2/t_3$  violan las desigualdades de Hasegawa (3.4). Específicamente, para un valor fijo de  $\theta$ , se puede seguir la trayectoria del par  $(t_1/t_3, t_2/t_3)$  como función de la magnitud  $\epsilon$ . En la Figura 3.9 se observa cómo al aumentar  $u$ , desde el estado no deformado  $u = 0$ , la trayectoria sale del área coloreada. El valor de  $u$  para el cual  $(t_1/t_3, t_2/t_3)$  se localiza en la frontera del área coloreada corresponde al desplazamiento mínimo necesario, en la dirección particular  $\theta$ , para lograr una brecha energética. Según este procedimiento, mostrado en la Figura 3.9, se llega a las siguientes conclusiones:

- i) El comportamiento frente a las distorsiones consideradas es periódico en  $\theta$ , con periodo  $2\pi/3$ , en concordancia con la simetría de la red del grafeno.

Este hecho es ilustrado por los paneles (a) y (b) de la Figura 3.10. Ambos gráficos muestran la equivalencia de la relación de dispersión (3.40) para los desplazamientos  $(u = 0.1, \theta = 3\pi/2)$  y  $(u = 0.1, \theta = \pi/6)$ . También véase la equivalencia entre los paneles (c) y (d) de la Figura 3.10.

- ii) Dentro de todos los posibles desplazamientos  $\mathbf{u}$ , los más eficientes para gene-



**Figura 3.10:** Los paneles (a)–(d) muestran gráficos de contorno de la relación de dispersión (3.40) para el mismo desplazamiento  $u = 0.1$  en diferentes direcciones: (a)  $\theta = 3\pi/2$ , (b)  $\theta = \pi/6$ , (c)  $\theta = \pi/2$  y (d)  $\theta = 11\pi/6$ . Los puntos rojos marcan la ubicación de los puntos de Dirac. En el panel (e) se grafica  $E_+(k_x, 0)$  para diferentes valores de  $u$  y  $\theta = -\pi/2$ , pudiendo apreciarse el acercamiento de los conos de Dirac a medida que  $u$  aumenta, hasta que finalmente aparece una brecha energética  $\Delta_g$ . En (f) aparece la dependencia de  $\Delta_g$  como función de  $u$ , para  $\theta = 3\pi/2$ .

rar una brecha energética en la estructura de bandas son aquellos que están en las direcciones de los primeros vecinos, es decir,  $\theta = \pi/3, 2\pi/3, 3\pi/2$ . El desplazamiento mínimo necesario resulta  $u = 0.133a$ .

Recordemos que la aparición de una brecha es el resultado de que dos conos de Dirac se fundan. Este proceso de fusión es presentado con detalle en la Figura 3.10 (e), donde se confirma la aparición de la brecha energética para desplazamientos superiores a 0.133. Justo para este valor crítico, se tiene un comportamiento mixto Dirac-Schrödinger, pues la relación de dispersión es lineal en la dirección  $k_x$  y cuadrática en la dirección  $k_y$ . En la Figura 3.6 (f) se puede observar la dependencia explícita de la brecha energética  $\Delta_g$  como función de  $u$ .

- iii) Los desplazamientos  $\mathbf{u}$  en las direcciones contrarias a los primeros vecinos ( $\theta = \pi/6, \pi/2, 5\pi/6$ ) no generan una brecha energética.

Para estas distorsiones los conos de Dirac no equivalentes se mueven en direcciones opuestas y nunca se encuentran, como puede ser apreciado en los paneles (c) y (d) de la Figura 3.10.

### 3.3.2. Hamiltoniano efectivo de Dirac

Si comparamos la expresión (3.40) con (3.3) vemos que el grafeno distorsionado es un caso particular de la red anisotrópica examinada en la Sección 3.1. En consecuencia, los resultados allí obtenidos pueden particularizarse para el grafeno distorsionado.

Expresando las integrales de salto (3.41) a primer orden en  $\mathbf{u}$  se obtiene

$$t_n \approx t(1 + \beta \boldsymbol{\delta}_n \cdot \mathbf{u}/a^2), \quad (3.42)$$

por tanto, para este caso se puede identificar de (3.5) que  $\Delta_n = \beta \boldsymbol{\delta}_n \cdot \mathbf{u}/a^2$ . Consecuentemente, a partir de (3.18) y (3.19), el hamiltoniano efectivo de Dirac para el grafeno distorsionado resulta [84]

$$H = \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\Delta}}^u) \cdot \mathbf{q}, \quad (3.43)$$

donde la matriz  $\bar{\boldsymbol{\Delta}}^u$  depende de las componentes del vector  $\mathbf{u}$  como

$$\bar{\boldsymbol{\Delta}}^u = \frac{\beta}{a} \begin{pmatrix} u_y & u_x \\ u_x & -u_y \end{pmatrix}. \quad (3.44)$$

Es inmediato verificar que para  $\mathbf{u} = 0$  se recupera el hamiltoniano de Dirac para el caso de grafeno prístino. Nótese que  $\text{Tr} \bar{\boldsymbol{\Delta}}^u = 0$ , lo cual responde con el hecho que la distorsión considerada no varía el área de la muestra de grafeno. Esto es análogo a tener una deformación cortante pura.

Debe tenerse presente que la forma (3.44) del tensor  $\bar{\boldsymbol{\Delta}}^u$  es referido al sistema de coordenadas cristalinas  $xy$ . Su expresión general respecto a un sistema arbitrario

$x'y'$ , el cual está rotado un ángulo  $\phi$  respecto a  $xy$ , es

$$\bar{\Delta}_{x'x'}^u = -\bar{\Delta}_{y'y'}^u = \frac{\beta}{a}(u_{y'} \cos 3\phi + u_{x'} \sin 3\phi), \quad (3.45)$$

$$\bar{\Delta}_{x'y'}^u = \bar{\Delta}_{y'x'}^u = \frac{\beta}{a}(-u_{y'} \sin 3\phi + u_{x'} \cos 3\phi), \quad (3.46)$$

donde  $u_{x'}$  y  $u_{y'}$  son las componentes del desplazamiento  $\mathbf{u}$  respecto al sistema  $x'y'$ . Estas expresiones para el tensor  $\bar{\Delta}^u(\phi)$  exhiben una clara periodicidad de  $2\pi/3$  en  $\phi$ , lo cual refleja la simetría trigonal de la red de panal subyacente.

## Modulación de las propiedades ópticas

### 4.1. Conductividad óptica de un sistema de Dirac anisotrópico

Con la misma idea del capítulo anterior, primero obtendremos las propiedades ópticas de un sistema bidimensional, cuyo comportamiento electrónico es descrito por el hamiltoniano efectivo de Dirac,

$$H = \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\Delta}}) \cdot \mathbf{q}, \quad (4.1)$$

para después particularizar los resultados al caso del grafeno deformado uniformemente.

Si asumimos que este sistema de Dirac anisotrópico exhibe una respuesta lineal ante un campo eléctrico externo oscilante de frecuencia  $\omega$ , su conductividad óptica puede ser deducida a partir del formalismo de Kubo [95–99]. Siguiendo la representación usada en [98, 99], el tensor de conductividad óptica puede ser escrito en la forma

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_{ij}(\omega) &= \frac{i}{\hbar} \int \int \text{Tr} \{ j_i \delta(H - E') j_j \delta(H - E) \} \\ &\times \frac{1}{E - E' + \omega - i\alpha} \frac{f(E) - f(E')}{E - E'} dE dE', \end{aligned} \quad (4.2)$$

donde  $f(E) = (1 + \exp[E/(k_B T)])^{-1}$  es la función de Fermi a temperatura  $T$  y

$j_l = -ie[H, r_l]$  es el operador de corriente en la dirección  $l$ , con  $l = x, y$ .

Para calcular la doble integral (4.2) para el grafeno deformado, resulta conveniente hacer el cambio de variables

$$\mathbf{q} = (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\mathbf{\Delta}})^{-1} \cdot \mathbf{q}^*. \quad (4.3)$$

En las nuevas variables  $\mathbf{q}^*$ , el hamiltoniano (4.1) adquiere la forma  $H = \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q}^*$ , que corresponde con el hamiltoniano de Dirac del grafeno prístino. Al mismo tiempo, aplicando la regla de la cadena, las componentes del operador de corriente se transforman como

$$\begin{aligned} j_x &= -ie[H, r_x] = e \frac{\partial H}{\partial q_x}, \\ &= e \left( \frac{\partial H}{\partial q_x^*} \frac{\partial q_x^*}{\partial q_x} + \frac{\partial H}{\partial q_y^*} \frac{\partial q_y^*}{\partial q_x} \right), \\ &= (1 + \bar{\Delta}_{xx}) j_x^* + \bar{\Delta}_{xy} j_y^*, \end{aligned} \quad (4.4)$$

mientras

$$j_y = (1 + \bar{\Delta}_{yy}) j_y^* + \bar{\Delta}_{xy} j_x^*, \quad (4.5)$$

donde  $j_x^* = e(\partial H / \partial q_x^*)$  y  $j_y^* = e(\partial H / \partial q_y^*)$  son las componentes del operador de corriente del grafeno prístino.

Sustituyendo (4.4) y (4.5) en (4.2), y calculando hasta primer orden en  $\bar{\Delta}_{ij}$ , las componentes del tensor de conductividad pueden ser expresadas como

$$\bar{\sigma}_{xx}(\omega) \simeq (1 + 2\bar{\Delta}_{xx} - \text{Tr}(\bar{\mathbf{\Delta}}))\sigma_0(\omega), \quad (4.6)$$

$$\bar{\sigma}_{yy}(\omega) \simeq (1 + 2\bar{\Delta}_{yy} - \text{Tr}(\bar{\mathbf{\Delta}}))\sigma_0(\omega), \quad (4.7)$$

$$\bar{\sigma}_{xy}(\omega) = \bar{\sigma}_{yx}(\omega) \simeq 2\bar{\Delta}_{xy}\sigma_0(\omega), \quad (4.8)$$

donde  $\sigma_0(\omega)$  es la conductividad del grafeno prístino.

Finalmente, de (4.6)–(4.8) se obtiene que el tensor de conductividad óptica de un sistema bidimensional electrónico, descrito por el hamiltoniano efectivo de Dirac

(4.1), está dado por [84]

$$\bar{\sigma}(\omega) \simeq \sigma_0(\omega)(\bar{\mathbf{I}} + 2\bar{\Delta} - \text{Tr}(\bar{\Delta})\bar{\mathbf{I}}) \quad (4.9)$$

a primer orden en  $\bar{\Delta}$ .

Es importante enfatizar que en la derivación de la expresión (4.9) no se asumió una forma explícita de  $\bar{\Delta}$ . Por lo tanto, este resultado general ahora se puede particularizar al caso de una red de panal ligeramente anisotrópica si  $\bar{\Delta}$  toma el valor dado por (3.18), o como veremos más adelante, al caso del grafeno deformado uniformemente.

## 4.2. Dicroísmo y transmitancia de un sistema de Dirac anisotrópico

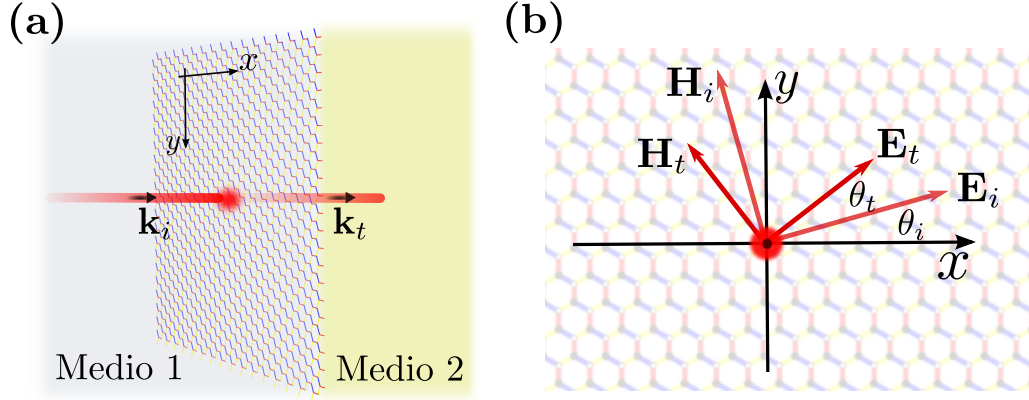
La absorción óptica anisotrópica de un material, como el discutido en la sección anterior, es responsable de dos efectos de interés: dicroísmo y modulación de su transmitancia. Para examinar estos efectos, consideremos la incidencia normal de luz linealmente polarizada sobre la superficie de separación entre dos medios dieléctricos caracterizados por las permitividades eléctricas  $\epsilon_{1,2}$  y las permeabilidades magnéticas  $\mu_{1,2}$ . Además, en la interfase se localiza un material bidimensional cuya conductividad óptica  $\bar{\sigma}(\omega)$  está dada por (4.9). Como es ilustrado la Figura 4.1 (b), los campos electromagnéticos incidente  $(\mathbf{E}_i, \mathbf{H}_i)$ , transmitido  $(\mathbf{E}_t, \mathbf{H}_t)$  y reflejado  $(\mathbf{E}_r, \mathbf{H}_r)$  descansan en el plano del material.

Para este problema, las condiciones de frontera de los campos electromagnéticos pueden ser inmediatamente expresadas como [100, 101]

$$\mathbf{E}_t - \mathbf{E}_i - \mathbf{E}_r = 0, \quad (4.10)$$

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{H}_t - \mathbf{H}_i - \mathbf{H}_r) = \mathbf{J}, \quad (4.11)$$

donde  $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$  es un vector unitario en la dirección  $z$  y  $\mathbf{J}$  es la densidad de corriente superficial. En cada medio los campos eléctrico y magnético están relacio-



**Figura 4.1:** (a) Problema de dispersión para incidencia normal de luz sobre dos medios dieléctricos separados por un material bidimensional conductor. El sistema de laboratorio es seleccionado tal que el eje  $z$  apunta a lo largo de la dirección de propagación. Por simplicidad, el vector de onda  $\mathbf{k}_r$  de la onda reflejada no es representado. (b) Representación esquemática del efecto de dicróismo inducido por la absorción anisotrópica del material bidimensional. Las polarizaciones incidente  $\theta_i$  y transmitida  $\theta_t$  son medidas respecto a un sistema de laboratorio  $xy$  arbitrario. Adaptada de [84].

nados por

$$\mathbf{H} = \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} \frac{\mathbf{k} \times \mathbf{E}}{k}, \quad (4.12)$$

y según la ley de Ohm

$$\mathbf{J} = \bar{\boldsymbol{\sigma}}(\omega) \cdot \mathbf{E}_t. \quad (4.13)$$

Combinando las ecuaciones (4.10)–(4.13), se obtiene la siguiente relación

$$\mathbf{E}_i = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\mu_1}{\epsilon_1}} \left( \left( \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}} + \sqrt{\frac{\epsilon_2}{\mu_2}} \right) \bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\sigma}} \right) \cdot \mathbf{E}_t, \quad (4.14)$$

entre el campo eléctrico  $\mathbf{E}_i$  de la onda incidente y el campo eléctrico  $\mathbf{E}_t$  de la onda transmitida. Esta expresión muestra claramente cómo una absorción óptica anisotrópica, expresada a través del tensor anisotrópico  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ , resulta en cierto grado de dicróismo pues, en general,  $\mathbf{E}_i$  y  $\mathbf{E}_t$  no son colineales. Nótese que solo en el caso que el tensor  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$  fuese isotrópico, los campos  $\mathbf{E}_i$  y  $\mathbf{E}_t$  son colineales y, por tanto, el dicróismo desaparece.



A partir de (4.14) el cálculo de la transmitancia resulta

$$T(\theta_i) = \frac{|\mathbf{E}_t \times \mathbf{H}_t|}{|\mathbf{E}_i \times \mathbf{H}_i|} = \frac{\sqrt{\epsilon_2/\mu_2} |\mathbf{E}_t|^2}{\sqrt{\epsilon_1/\mu_1} |\mathbf{E}_i|^2}, \quad (4.15)$$

$$\approx T_0 \left( 1 - \frac{2\sqrt{\mu_1\mu_2}}{\sqrt{\epsilon_1\mu_2} + \sqrt{\epsilon_2\mu_1}} \text{Re}[\bar{\sigma}_{xx} \cos^2 \theta_i + \bar{\sigma}_{yy} \sin^2 \theta_i + \bar{\sigma}_{xy} \sin 2\theta_i] \right),$$

donde  $T_0 = 4\sqrt{\epsilon_1\mu_1\epsilon_2\mu_2}/(\epsilon_1\mu_2 + \epsilon_2\mu_1)^2$  es la transmitancia en ausencia del material bidimensional en la interfase entre ambos medios y  $\theta_i$  es el ángulo de polarización de la radiación incidente. El término  $\text{Re}[\bar{\sigma}_{xx} \cos^2 \theta_i + \bar{\sigma}_{yy} \sin^2 \theta_i + \bar{\sigma}_{xy} \sin 2\theta_i]$  manifiesta cómo la absorción anisotrópica es responsable de la dependencia en  $\theta_i$  de la transmitancia.

Con el fin de desvelar más claramente el efecto de dicroísmo y la modulación de  $T(\theta_i)$ , asumamos que ambos medios son el vacío, por tanto,  $(\epsilon_{1,2} = \epsilon_0, \mu_{1,2} = \mu_0)$  en las ecuaciones (4.14) y (4.15). Además, en la expresión (4.9), reemplazaremos  $\sigma_0(\omega)$  por el valor  $e^2/(4\hbar)$ , el cual corresponde con la conductividad óptica del grafeno prístino en el visible [15, 97]. Bajo estas consideraciones, y calculando a primer orden en  $\bar{\Delta}_{ij}$ , nosotros obtuvimos que [84]

$$\theta_t - \theta_i \approx \frac{\pi\alpha}{2} \Lambda \sin 2(\theta_i - \theta_0) \quad (4.16)$$

$$T(\theta_i) \approx 1 - \pi\alpha - \pi\alpha\Lambda \cos 2(\theta_i - \theta_0) \quad (4.17)$$

donde

$$\Lambda = \sqrt{(\bar{\Delta}_{xx} - \bar{\Delta}_{yy})^2 + 4\bar{\Delta}_{xy}^2} = \sqrt{\text{Tr}(\bar{\Delta})^2 - 4\text{Det}(\bar{\Delta})}, \quad (4.18)$$

$$\sin 2\theta_0 = 2\bar{\Delta}_{xy}/\Lambda, \quad \cos 2\theta_0 = (\bar{\Delta}_{xx} - \bar{\Delta}_{yy})/\Lambda, \quad (4.19)$$

y  $\alpha$  es la constante de estructura fina.

Es inmediato verificar en (4.16) que para  $\bar{\Delta} = 0$  el dicroísmo desaparece, pues  $\theta_t = \theta_i$ . Al mismo tiempo,  $T(\theta_i)$  se reduce al valor  $1 - \pi\alpha$  ( $\approx 97.7\%$ ) [15], el cual es la transmitancia del grafeno prístino, como se vió en la Sección 2.4.3.

Las expresiones (4.16) y (4.17) muestran que el dicrosimo, al igual que la trans-

mitancia, tienen dependencias sinusoidales con respecto al ángulo de polarización incidente  $\theta_i$  con periodo  $\pi$ . Esta periodicidad obedece a la equivalencia física entre  $\theta_i$  y  $\theta_i + \pi$  para incidencia normal de luz linealmente polarizada. Estas modulaciones permiten determinar las direcciones principales del tensor  $\bar{\Delta}$  al monitorear (4.16) o (4.17), a medida que  $\theta_i$  se varía. Por ejemplo, según (4.16) y (4.19), las direcciones principales del tensor  $\bar{\Delta}$  corresponden con los valores de  $\theta_i$  para los cuales las polarizaciones incidente y reflejada coinciden. De igual modo, a partir de (4.17) y (4.19) se puede concluir que las direcciones principales del tensor  $\bar{\Delta}$  son aquellas para las cuales la transmitancia tiene su valor mínimo o máximo.

Nótese que la fase  $\theta_0$  de ambas modulaciones sinusoidales depende de la elección del sistema de laboratorio  $xy$ . Sin embargo, las amplitudes de las modulaciones sinusoidales del dicroísmo y la transmitancia,  $\pi\alpha\Lambda$  y  $2\pi\alpha\Lambda$ , respectivamente, son independientes de cualquier elección del sistema de laboratorio  $xy$ . Matemáticamente esto queda justificado por la ecuación (4.18), ya que el factor de amplitud  $\Lambda$  es expresado en función de los invariantes  $\text{Tr}(\bar{\Delta})$  y  $\text{Det}(\bar{\Delta})$ .

Hasta aquí, las expresiones (4.16) y (4.17) son generales, pues en sus derivaciones no se asumió una forma explícita de  $\bar{\Delta}$ . A continuación estos resultados se aplicarán al caso del grafeno bajo una deformación uniforme.

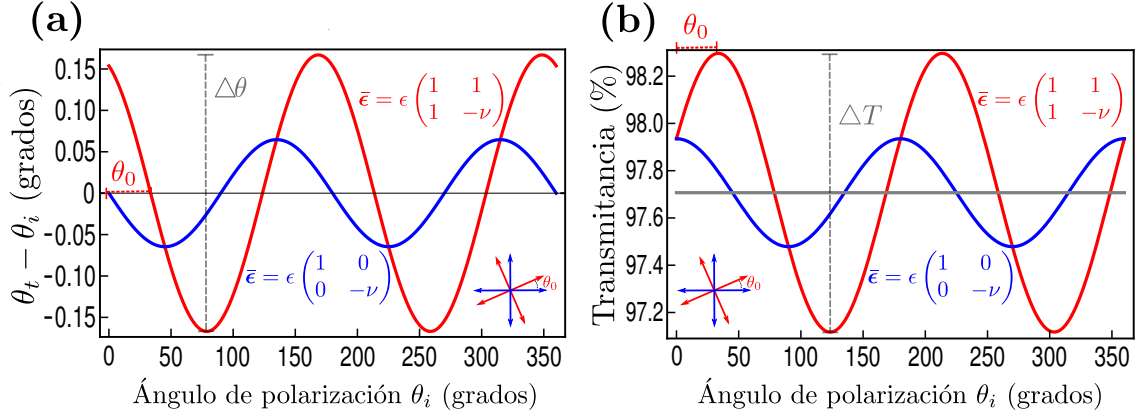
### 4.3. Grafeno deformado uniformemente: propiedades ópticas

Como se dedujo en la Sección 3.2.2, el hamiltoniano efectivo de Dirac para el grafeno deformado uniformemente, a primer orden en el tensor de deformaciones  $\bar{\epsilon}$ , puede ser escrito como [80]

$$H = \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\bar{\mathbf{I}} - \tilde{\beta} \bar{\boldsymbol{\epsilon}}) \cdot \mathbf{q} \quad (4.20)$$

donde  $\tilde{\beta} = \beta - 1$ .

Por simple comparación se observa que (4.20) es un caso particular del hamiltoniano (4.1) para  $\bar{\Delta} = -\tilde{\beta} \bar{\boldsymbol{\epsilon}}$ . En consecuencia, para evaluar las propiedades ópticas



**Figura 4.2:** (a) Rotación del campo transmitido y (b) transmitancia como funciones del ángulo de polarización incidente para dos deformaciones diferentes. La línea azul corresponde con una deformación uniaxial, mientras la línea roja es para una deformación combinada (uniaxial + cortante). Para ambas deformaciones  $\epsilon = 0.05$ . Adaptada de [104].

del grafeno deformado uniformemente, basta reemplazar  $\bar{\Delta}$  por  $-\tilde{\beta}\bar{\epsilon}$  en las expresiones (4.9), (4.16) y (4.17). Haciendo esta simple sustitución se obtienen nuestros siguientes resultados:

- i) Tensor de conductividad óptica [102, 103]

$$\bar{\sigma}(\omega) \simeq \sigma_0(\omega)(\bar{I} - 2\tilde{\beta}\bar{\epsilon} + \tilde{\beta}\text{Tr}(\bar{\epsilon})\bar{I}) \quad (4.21)$$

- ii) Dicroísmo [104]

$$\theta_t - \theta_i \approx \frac{\pi\alpha\tilde{\beta}}{2}((\bar{\epsilon}_{yy} - \bar{\epsilon}_{xx}) \sin 2\theta_i + 2\bar{\epsilon}_{xy} \cos 2\theta_i) \quad (4.22)$$

- iii) Transmitancia [104]

$$T(\theta_i) \approx 1 - \pi\alpha + \pi\alpha\tilde{\beta}((\bar{\epsilon}_{xx} - \bar{\epsilon}_{yy}) \cos 2\theta_i + 2\bar{\epsilon}_{xy} \sin 2\theta_i) \quad (4.23)$$

Estas expresiones son aplicables a cualquier deformación uniforme, ya sea a una deformación uniaxial o a un escenario más general de una deformación biaxial [105].

En la Figura 4.2 (a), por medio de la diferencia  $\theta_t - \theta_i$  se presenta el carácter dicroico del grafeno bajo dos deformaciones uniformes. Las modulaciones sinusiodales están desfasadas pues los ejes principales de ambas deformaciones no son colineales. Para la deformación uniaxial, los ejes principales de la deformación coinciden con los ejes de laboratorio  $xy$ . En este caso (véase la curva azul), la diferencia  $\theta_t - \theta_i$  se comporta como  $-\sin 2\theta_i$ . En cambio, para la deformación combinada (uniaxial + cortante) sus ejes principales no coinciden con los ejes de laboratorio  $xy$  y la diferencia  $\theta_t - \theta_i$  va como  $-\sin 2(\theta_i - \theta_0)$  (véase la curva roja), donde  $2\theta_0 = \arctan[2\bar{\epsilon}_{xy}/(\bar{\epsilon}_{xx} - \bar{\epsilon}_{yy})] \approx 60^\circ$ . Como fue anticipado en la sección anterior, este comportamiento permite identificar las direcciones de los ejes principales del tensor de deformaciones  $\bar{\epsilon}$  determinando los valores  $\theta_i$  para los cuales las polarizaciones incidente y transmitida coinciden. Desde un punto de vista práctico es importante señalar que los ángulos de polarización pueden ser medidos con una precisión por debajo de  $0.001^\circ$ , con lo cual la modulación predicha por (4.22) pudiera ser experimentalmente observada.

Por otro lado, la medición de la transmitancia también ofrece la posibilidad de determinar las direcciones de los ejes principales del tensor de deformaciones  $\bar{\epsilon}$ . Para ello solo sería necesario hacer dos mediciones,  $T(0^\circ)$  y  $T(45^\circ)$ . A partir de (4.23) se obtienen

$$\bar{\epsilon}_{xx} - \bar{\epsilon}_{yy} \approx (T(0^\circ) - 1 + \pi\alpha)/\pi\alpha\tilde{\beta}, \quad (4.24)$$

$$2\bar{\epsilon}_{xy} \approx (T(45^\circ) - 1 + \pi\alpha)/\pi\alpha\tilde{\beta}. \quad (4.25)$$

Dadas las cantidades (4.24) y (4.25) respecto al sistema de laboratorio  $xy$ , se conoce que el tensor de deformaciones es diagonal en el sistema coordenado  $x'y'$ , el cual está rotado un ángulo  $\theta_0$  respecto al sistema  $xy$ , con  $\tan 2\theta_0 = 2\bar{\epsilon}_{xy}/(\bar{\epsilon}_{xx} - \bar{\epsilon}_{yy})$ . Por lo tanto, de (4.24) y (4.25), el ángulo  $\theta_0$ , que define los ejes principales del tensor de deformaciones, queda determinado por la expresión

$$\tan 2\theta_0 = \frac{1 - \pi\alpha - T(45^\circ)}{1 - \pi\alpha - T(0^\circ)}, \quad (4.26)$$

en función de las dos mediciones de transmitancia.

De manera general, la medición de la transmitancia (o la diferencia  $\theta_t - \theta_i$ ) no posibilita determinar completamente el tensor de deformaciones  $\bar{\epsilon}$ . Experimentalmente, de la modulación sinusoidal de  $T(\theta_i)$  se pueden extraer dos cantidades: la

amplitud y la fase  $\theta_0$ . Por su parte, para una caracterización general de  $\bar{\epsilon}$  se requiere conocer tres cantidades:  $\bar{\epsilon}_{xx}$ ,  $\bar{\epsilon}_{yy}$  y  $\bar{\epsilon}_{xy}$ . Por lo tanto, a partir de la amplitud y la fase no es posible caracterizar las tres componentes del tensor de deformaciones  $\bar{\epsilon}$ . Sin embargo, en el caso de una deformación uniaxial la medición de la transmitancia sí permite determinar el estado de deformación [29, 30].

### 4.3.1. Deformación uniaxial

Particularicemos de manera explícita nuestros resultados (4.21), (4.22) y (4.23) para el caso de una deformación uniaxial en la dirección  $x$ , tal que, el tensor de deformaciones está dado por

$$\bar{\epsilon} = \epsilon \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -\nu \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

Inmediatamente se obtiene que el tensor de conductividad óptica del grafeno bajo la deformación uniaxial (4.27) es

$$\bar{\sigma}(\omega) \approx \sigma_0(\omega) \begin{pmatrix} 1 - \tilde{\beta}\epsilon(1 + \nu) & 0 \\ 0 & 1 + \tilde{\beta}\epsilon(1 + \nu) \end{pmatrix}, \quad (4.28)$$

de donde se extraen los valores  $\sigma_{L,T} \equiv \sigma_{xx,yy} = \sigma_0(\omega)(1 \mp \tilde{\beta}\epsilon(1 + \nu))$ , que inicialmente fueron reportados en [29]. Como consecuencia, un estiramiento en la dirección  $x$  produce una disminución de  $\sigma_{xx}$  y un incremento, en la misma magnitud, de  $\sigma_{yy}$ . La dependencia lineal en  $\epsilon$  de la expresión analítica (4.28) fue confirmada en [29], por cálculos *ab initio*, al menos hasta  $\epsilon = 0.1(10\%)$ . Esto ofrece un rango bastante amplio de deformación uniaxial ( $0 \leq \epsilon \leq 0.1$ ) para el cual (4.28) es válida.

Sustituyendo (4.27) en (4.22) se obtiene que el dichroísmo es caracterizado por

$$\theta_t - \theta_i \approx -\frac{\pi\alpha\tilde{\beta}}{2}\epsilon(1 + \nu) \sin 2\theta_i, \quad (4.29)$$

mientras de (4.27) y (4.23), la transmitancia resulta

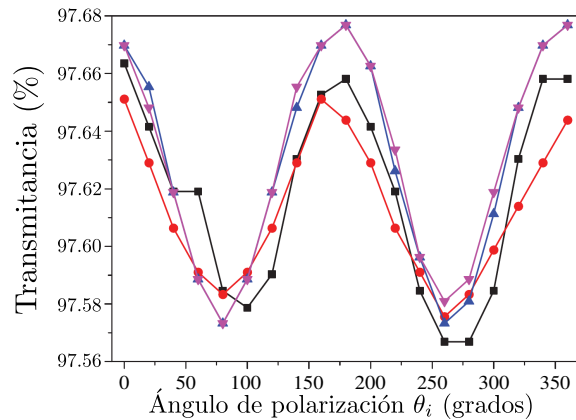
$$T(\theta_i) \approx 1 - \pi\alpha + \pi\alpha\tilde{\beta}\epsilon(1 + \nu) \cos 2\theta_i. \quad (4.30)$$

Como resultado, a partir de cualquiera de estas dos modulaciones sinusoidales es posible expresar la magnitud de la deformación  $\epsilon$  en función de sus amplitudes. Por ejemplo, a partir de (4.30) se tiene que

$$\Delta T \equiv T_{\text{máx.}} - T_{\text{mín.}} \approx 2\pi\alpha\tilde{\beta}(1 + \nu)\epsilon, \quad (4.31)$$

entonces, midiendo  $\Delta T$  se podrá determinar la magnitud  $\epsilon$ .

En [30] crecieron grafeno por depósito químico en fase vapor sobre láminas de cobre. Como resultado del proceso de crecimiento sobre cobre obtuvieron grafeno deformado, lo cual es debido a las diferencias entre las constantes de red y los coeficientes de expansión térmica de ambos cristales. Posteriormente, transfirieron el grafeno deformado a un sustrato de tereftalato de polietileno, cuya altísima transparencia permite medir de manera precisa la transmitancia del grafeno. En la Figura 4.3 se muestran las mediciones reportadas en [30] de la transmitancia como función de la polarización incidente. La clara modulación sinusoidal observada, de amplitud  $\Delta T \approx 0.1\%$ , fue asociada con una deformación uniaxial del grafeno. Basados en la expresión (4.31), estimaron que la magnitud de la deformación era del orden del 0.5%, resultado que fue comprobado por espectroscopía Raman.



**Figura 4.3:** Mediciones de la transmitancia óptica del grafeno bajo una deformación uniaxial. Las diferentes curvas representan diferentes posiciones del haz del láser sobre la muestra del grafeno deformado. Adaptada de [30].

## 4.4. Grafeno distorsionado: propiedades ópticas

En la Sección 3.3, se obtuvo que el hamiltoniano efectivo de Dirac para el grafeno distorsionado, a primer orden en el desplazamiento  $\bar{\epsilon}$ , está dado por [84]

$$H = \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\Delta}^u) \cdot \mathbf{q} \quad (4.32)$$

donde

$$\bar{\Delta}^u = \frac{\beta}{a} \begin{pmatrix} u_y & u_x \\ u_x & -u_y \end{pmatrix}, \quad (4.33)$$

es referida al sistema de coordenadas cristalinas  $xy$ .

Claramente se observa que (4.32) es un caso particular del hamiltoniano (4.1) para  $\bar{\Delta} = \bar{\Delta}^u$ . Entonces, para obtener la conductividad óptica del grafeno distorsionado basta hacer la sustitución  $\bar{\Delta} = \bar{\Delta}^u$  en (4.9), lo cual arroja el resultado

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}(\omega) &= \sigma_0(\omega)(\bar{\mathbf{I}} + 2\bar{\Delta}^u), \\ &= \sigma_0(\omega) \begin{pmatrix} 1 + 2\beta u_y/a & 2\beta u_x/a \\ 2\beta u_x/a & 1 - 2\beta u_y/a \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.34)$$

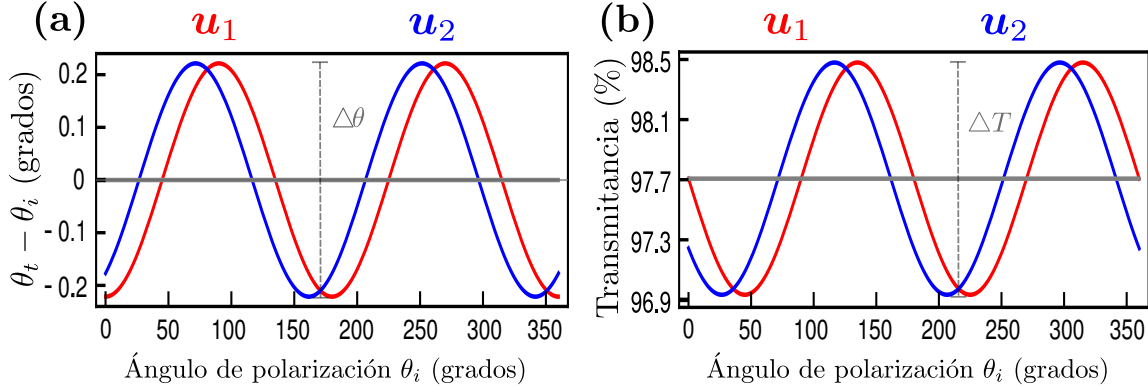
Bajo esta misma sustitución, a partir de las expresiones generales (4.16) y (4.17) se obtiene que el dichroísmo y la transmitancia para grafeno distorsionado están caracterizados por

$$\theta_t - \theta_i \approx \frac{\pi\alpha\beta}{a}(u_y \sin 2\theta_i - u_x \cos 2\theta_i) \quad (4.35)$$

$$T(\theta_i) \approx 1 - \pi\alpha - \frac{2\pi\alpha\beta}{a}(u_y \cos 2\theta_i + u_x \sin 2\theta_i) \quad (4.36)$$

donde el ángulo de polarización de la radiación incidente  $\theta_i$  es medido con respecto al eje  $x$  del sistema de coordenadas cristalinas.

En la Figura 4.4 se muestran las expresiones (4.35) y (4.36) para dos diferentes desplazamientos,  $\mathbf{u}_1/a = (0.05, 0)$  and  $\mathbf{u}_2/a = (0.04, 0.03)$ . Estas distorsiones



**Figura 4.4:** (a) Rotación del campo transmitido y (b) transmitancia como funciones del ángulo de polarización incidente para dos distorsiones diferentes. La curva roja corresponde con el desplazamiento  $\mathbf{u}_1/a = (0.05, 0)$ , mientras la curva azul corresponde con  $\mathbf{u}_2/a = (0.04, 0.03)$ . Adaptada de [84].

presentan las mismas amplitudes de modulación tanto para la rotación del campo transmitido (dicroísmo) como para la transmitancia. La razón es simple. A partir de (4.36) se puede mostrar que la amplitud de la modulación  $\Delta T$  para la transmitancia está determinada por el módulo del vector  $\mathbf{u}$ :  $\Delta T = 2\pi\alpha\beta|\mathbf{u}|/a$ . Nótese que  $|\mathbf{u}_1| = |\mathbf{u}_2|$ , por tanto,  $\Delta T_1 = \Delta T_2$ . Un argumento análogo es válido para la amplitud de la modulación para la rotación del campo transmitido:  $\Delta\theta = \pi\alpha\beta|\mathbf{u}|/a$ .

Para finalizar, señalemos cómo a través de dos mediciones de la transmitancia es posible caracterizar el estado de distorsión. Midiendo la transmitancia para  $\theta_i = 0^\circ$  y  $\theta_i = 45^\circ$ , de (4.36) se tiene que

$$u_x = \frac{a}{2\pi\alpha\beta}(1 - \pi\alpha - T(45^\circ)), \quad (4.37)$$

$$u_y = \frac{a}{2\pi\alpha\beta}(1 - \pi\alpha - T(0^\circ)), \quad (4.38)$$

y de esta manera la distorsión queda determinada.



## Deformaciones no uniformes

### 5.1. De deformaciones uniformes a no uniformes

Consideremos ahora que el grafeno está sometido a una deformación no uniforme, es decir, dependiente de la posición, y que varía suavemente sobre la escala de la constante de la red. En principio, la teoría para el grafeno deformado no uniformemente debería describir el caso particular del grafeno bajo una deformación uniforme. Por tanto, el hamiltoniano efectivo de Dirac para deformaciones no uniformes debería reducirse, en el límite adecuado, al hamiltoniano (3.36) que se obtuvo para deformaciones uniformes. Sin embargo, esta congruencia en la teoría fue descuidada hasta hace muy poco [81]. A continuación presentamos una propuesta de cómo obtener el hamiltoniano efectivo de Dirac del grafeno bajo deformaciones no uniformes [81].

Para resolver este problema, se parte del hamiltoniano uniforme y se cambia  $\bar{\epsilon}$  por  $\bar{\epsilon}(\mathbf{r})$ , con lo cual el tensor velocidad de Fermi  $\bar{\mathbf{v}}(\mathbf{r})$  se vuelve dependiente de la posición. En consecuencia, los términos de la forma  $\bar{v}_{ij}q_l$  violan la hermiticidad del hamiltoniano resultante. Para asegurar la hermiticidad, algunos autores han reemplazado los productos  $\bar{v}_{ij}q_l$  por sus correspondientes combinaciones simétricas  $\bar{v}_{ij}(\mathbf{r}) \left( -i \frac{\partial}{\partial r_l} \right) - \frac{i}{2} \frac{\partial \bar{v}_{ij}(\mathbf{r})}{\partial r_l}$  [46, 106–108]. En tales trabajos, el punto de partida no fue apropiado porque utilizaron un hamiltoniano uniforme calculado alrededor de  $\mathbf{K}_+$ . Como se demostró en la Sección 3.2.2, para obtener correctamente el hamiltoniano efectivo de Dirac para el grafeno deformado uniformemente, el desarrollo debe llevarse a cabo en la vecindad del punto de Dirac  $\mathbf{K}_D$ . Esto requiere tomar en cuenta

el corrimiento de  $\mathbf{K}_D$  debido a la deformación. Nótese que el caso uniforme se tiene que  $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{K}_D$ , donde la posición del punto de Dirac  $\mathbf{K}_D$  depende del tensor de deformaciones  $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}$ . Al cambiar  $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}$  por  $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{r})$ , entonces  $\mathbf{k} - \mathbf{K}_D$  debe ser reemplazado por  $-i\nabla - \mathbf{K}_D(\mathbf{r})$ . Entonces, para obtener el hamiltoniano no uniforme se debe partir del hamiltoniano uniforme (alrededor de  $\mathbf{K}_D^+$ ) en el espacio de los momentos y pasar al espacio real por medio de la sustitución [81–83, 109]

$$\bar{v}_{ij}q_l \rightarrow \bar{v}_{ij}(\mathbf{r}) \left( -i\frac{\partial}{\partial r_l} - K_l^D(\mathbf{r}) \right) - \frac{i}{2} \frac{\partial \bar{v}_{ij}(\mathbf{r})}{\partial r_l} \quad (5.1)$$

Este procedimiento corresponde con un esquema general de emergencia de gravedad y campos *gauge* en la vecindad del puntos de Dirac, Weyl y Majorana, de ciertos espectros de energía [110–112]. Más allá del grafeno, esta idea ha sido empleada recientemente para obtener el hamiltoniano efectivo de baja energía de semimetales de Weyl (con simetría cúbica) bajo deformaciones no uniformes [109].

## 5.2. Hamiltoniano uniforme: una revisión

Bajo un campo de desplazamientos  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ , los vectores a los tres primeros vecinos se transforman aproximadamente como [113]

$$\boldsymbol{\delta}'_n \approx (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\mathbf{u}}) \cdot \boldsymbol{\delta}_n, \quad (5.2)$$

donde  $\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{r})$  es el tensor gradiente de desplazamientos:

$$\begin{aligned} \bar{u}_{ij}(\mathbf{r}) &= \partial_j u_i = (\partial_j u_i + \partial_i u_j)/2 + (\partial_j u_i - \partial_i u_j)/2, \\ &= \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{ij}(\mathbf{r}) + \bar{\boldsymbol{\omega}}_{ij}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (5.3)$$

siendo  $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{r})$  el tensor de deformaciones y  $\bar{\boldsymbol{\omega}}(\mathbf{r})$  el tensor de rotaciones. Cuando el tensor de rotaciones  $\bar{\boldsymbol{\omega}}(\mathbf{r})$  es dependiente de la posición, describe las rotaciones locales asociadas al campo de desplazamientos  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ ; mientras que si  $\bar{\boldsymbol{\omega}}$  no depende de la posición, este respresenta una rotación global del grafeno que no tiene implicaciones físicas.

A diferencia de los vectores deformados  $\delta'_n$ , las integrales de saltos  $t_n$  no dependen del tensor antisimétrico  $\bar{\omega}(\mathbf{r})$ ,

$$\begin{aligned} t_n &\approx t \left( 1 - \frac{\beta}{a^2} \delta_n \cdot \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) \cdot \delta_n \right), \\ &\approx t \left( 1 - \frac{\beta}{a^2} \delta_n \cdot \bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{r}) \cdot \delta_n \right), \end{aligned} \quad (5.4)$$

lo cual es un resultado esperado ya que las rotaciones no afectan los módulos de  $\delta'_n$ .

En aras de incluir las rotaciones locales en el problema del grafeno deformado no uniformemente, inicialmente asumiremos que  $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}$  y  $\bar{\omega}$  son independientes de la posición y derivaremos el hamiltoniano uniforme para después, por medio de la sustitución (5.1), obtener el hamiltoniano no uniforme. A partir de (5.2) y (5.4), sin necesidad de hacer algún cálculo, podemos inferir que el tensor  $\bar{\omega}(\mathbf{r})$  solamente aparecerá en términos independientes de  $\beta$ , es decir, en términos puramente geométricos.

Haciendo un análisis análogo al de la Sección 3.2.2, donde no se consideró el término de rotación  $\bar{\omega}$ , los resultados obtenidos en la Sección 3.1.2 para redes de panal anisotrópicas pueden extenderse al caso del grafeno bajo una pequeña deformación uniforme (5.3) si se hacen las sustituciones

$$\Delta_n \rightarrow -\frac{\beta}{a^2} \delta_n \cdot \bar{\boldsymbol{\epsilon}} \cdot \delta_n, \quad (5.5)$$

$$\mathbf{k} \rightarrow (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}} - \bar{\boldsymbol{\omega}}) \cdot \mathbf{k}. \quad (5.6)$$

En consecuencia, a partir de (3.9) y (5.6) se obtiene que las posiciones de los puntos de Dirac  $\mathbf{K}_D^\pm$  están dadas por [81]

$$\mathbf{K}_D^\pm \approx (\bar{\mathbf{I}} - \bar{\boldsymbol{\epsilon}} + \bar{\boldsymbol{\omega}}) \cdot \mathbf{K}_\pm \pm \mathbf{A}, \quad (5.7)$$

con  $\mathbf{A}$  expresado según (3.35). De igual manera que en la Sección 3.2.2, de (5.5) y (3.18) se obtiene que la matriz  $\bar{\Delta}$ , definida en la Sección 3.1.2, adquiere la forma particular  $\bar{\Delta} = -\beta\bar{\boldsymbol{\epsilon}}$ . Por lo tanto, de (5.6) y (3.19) se obtiene que el hamiltoniano uniforme, en la vecindad del punto de Dirac  $\mathbf{K}_D^+$ , resulta [81]

$$H = \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}} - \bar{\boldsymbol{\omega}} - \beta\bar{\boldsymbol{\epsilon}}) \cdot \mathbf{q}, \quad (5.8)$$

donde  $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{K}_D^+$ .

Las expresiones (5.7) y (5.8), calculadas explícitamente en [81], pueden considerarse generalizaciones de las expresiones (3.34) y (3.36), obtenidas en la Sección 3.2.2 para el caso del grafeno deformado uniformemente.

### 5.3. Hamiltoniano generalizado de Dirac bajo deformaciones no uniformes

Ahora, para extender el hamiltoniano uniforme (5.8) al caso de deformaciones no uniformes asumimos que  $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{r})$  y  $\bar{\boldsymbol{\omega}}(\mathbf{r})$  son dependientes de la posición y pasamos al espacio real por medio del reemplazo (5.1). En consecuencia, el hamiltoniano efectivo de Dirac para el grafeno deformado no uniformemente resulta

$$H = \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{r}) \cdot (-i\nabla - \mathbf{K}_D(\mathbf{r})) - \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Gamma} \quad (5.9)$$

donde

$$\bar{\mathbf{v}}(\mathbf{r}) = v_F (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{r}) - \bar{\boldsymbol{\omega}}(\mathbf{r}) - \beta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{r})), \quad (5.10)$$

$$\mathbf{K}_D(\mathbf{r}) = (\bar{\mathbf{I}} - \bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{r}) + \bar{\boldsymbol{\omega}}(\mathbf{r})) \cdot \mathbf{K} + \mathbf{A}(\mathbf{r}), \quad (5.11)$$

y

$$\Gamma_i = \sum_{j=1}^2 \frac{i}{2v_F} \frac{\partial \bar{v}_{ij}(\mathbf{r})}{\partial r_j} = \sum_{j=1}^2 \frac{i(1-\beta)}{2} \frac{\partial \bar{\epsilon}_{ij}(\mathbf{r})}{\partial r_j} - \frac{i}{2} \frac{\partial \bar{\omega}_{ij}(\mathbf{r})}{\partial r_j}, \quad (5.12)$$

son las componentes de un campo complejo  $\boldsymbol{\Gamma}$ .

Sin embargo, el tensor de rotaciones locales  $\bar{\boldsymbol{\omega}}(\mathbf{r})$  puede ser eliminado de las expresiones (5.10) y (5.12) si el espinor se transforma como

$$\boldsymbol{\Psi} \rightarrow \exp\left(\frac{i}{2} \bar{\omega}_{xy} \sigma_3\right) \boldsymbol{\Psi} \approx \boldsymbol{\Psi} + \frac{i}{2} \bar{\omega}_{xy} \sigma_3 \boldsymbol{\Psi}. \quad (5.13)$$

De esta forma, el tensor velocidad de Fermi  $\bar{\mathbf{v}}(\mathbf{r})$  para deformaciones no uniformes

adquire la forma definitiva

$$\bar{\mathbf{v}}(\mathbf{r}) = v_F (\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{r}) - \beta \bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{r})) \quad (5.14)$$

la cual coincide con la expresión (3.37) para el caso uniforme. Consecuentemente, el campo complejo  $\mathbf{\Gamma}$  se reduce a

$$\Gamma_i = \sum_{j=1}^2 \frac{i}{2v_F} \frac{\partial \bar{v}_{ij}(\mathbf{r})}{\partial r_j} = \sum_{j=1}^2 \frac{i(1-\beta)}{2} \frac{\partial \bar{\epsilon}_{ij}(\mathbf{r})}{\partial r_j} \quad (5.15)$$

El mérito principal de nuestro hamiltoniano generalizado (5.9), respecto a los hamiltonianos reportados en la literatura, radica en que este reproduce el hamiltoniano uniforme (3.36) de manera consistente cuando el tensor de deformaciones  $\boldsymbol{\epsilon}$  es independiente de la posición. El ingrediente responsable de tal mérito es la expresión del tensor velocidad de Fermi (5.15), la cual difiere de las expresiones previas. Citemos como ejemplo la expresión (21) en [46]

$$\bar{\mathbf{v}} = v_F \left( \bar{\mathbf{I}} - \frac{\beta}{4} (2\bar{\boldsymbol{\epsilon}} + \text{Tr}(\bar{\boldsymbol{\epsilon}})\bar{\mathbf{I}}) \right), \quad (5.16)$$

(véase también la expresión (13) en [108]), o la expresión (13) en [107]

$$\bar{\mathbf{v}} = v_F \left( \bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}} - \frac{\beta}{4} (2\bar{\boldsymbol{\epsilon}} + \text{Tr}(\bar{\boldsymbol{\epsilon}})\bar{\mathbf{I}}) \right). \quad (5.17)$$

Por simple inspección puede verse que tanto (5.16) como (5.17) no reproducen adecuadamente la expresión (3.37) del tensor velocidad de Fermi para el caso uniforme. Particularmente, en la Sección 3.2.2 se demostró que (5.16) no satisface una sencilla prueba de consistencia para el caso de una deformación isotrópica. La inconsistencia de las expresiones (5.16) y (5.17) reside en el hecho que fueron calculadas sin tomar en cuenta el corrimiento de los puntos de Dirac debido a las deformaciones.

## 5.4. Campos pseudomagnéticos

En el marco del procedimiento llevado a cabo para obtener el hamiltoniano generalizado (5.9), la dependencia espacial  $\mathbf{K}_D(\mathbf{r})$  del “punto de Dirac” puede ser interpretada como un campo pseudomagnético. En efecto, al tomar el rotacional bidimensional de (5.11) conduce al campo pseudomagnético

$$\begin{aligned} B &= \nabla \times \mathbf{K}_D^+(\mathbf{r}), \\ &= \nabla \times ((\bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{r}) - \bar{\boldsymbol{\omega}}(\mathbf{r})) \cdot \mathbf{K}_+) + \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (5.18)$$

el cual es perpendicular a la muestra del grafeno.

Demostremos que un término de la forma  $(\bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{r}) - \bar{\boldsymbol{\omega}}(\mathbf{r})) \cdot \mathbf{K}$  no contribuye al campo pseudomagnético. Explícitamente se tiene que

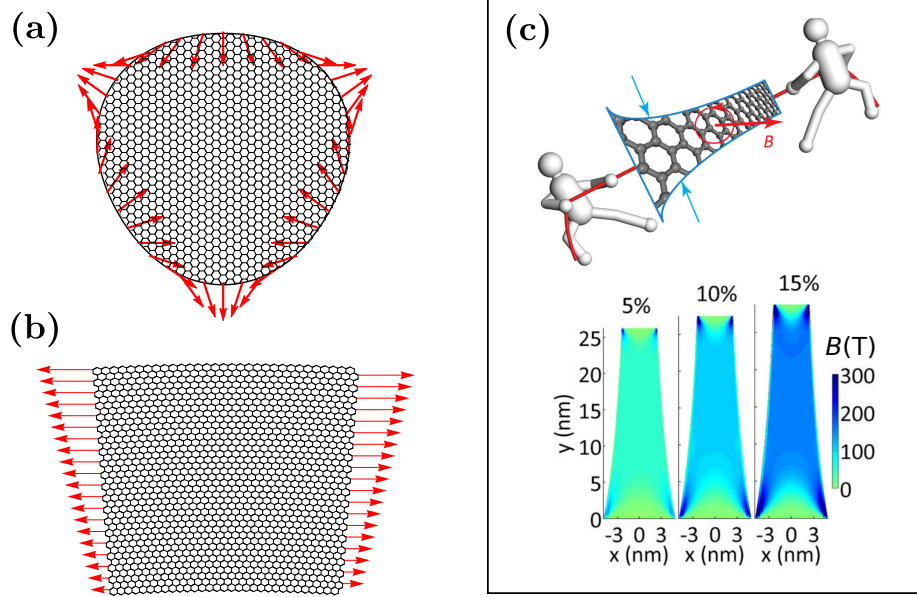
$$(\bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{r}) - \bar{\boldsymbol{\omega}}(\mathbf{r})) \cdot \mathbf{K} = \begin{pmatrix} K_x \bar{\epsilon}_{xx} + K_y \bar{\epsilon}_{xy} - K_y \bar{\omega}_{xy} \\ K_x \bar{\epsilon}_{xy} + K_y \bar{\epsilon}_{yy} - K_x \bar{\omega}_{yx} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_x \bar{u}_{xx} + K_y \bar{u}_{yx} \\ K_x \bar{u}_{xy} + K_y \bar{u}_{yy} \end{pmatrix}, \quad (5.19)$$

por tanto,

$$\begin{aligned} \nabla \times ((\bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{r}) - \bar{\boldsymbol{\omega}}(\mathbf{r})) \cdot \mathbf{K}) &= \partial_x (K_x \bar{u}_{xy} + K_y \bar{u}_{yy}) - \partial_y (K_x \bar{u}_{xx} + K_y \bar{u}_{yx}), \\ &= \cancel{K_x \partial_{xy} u_x} + K_y \partial_{xy} u_y - \cancel{K_x \partial_{yx} u_x} - \cancel{K_y \partial_{yx} u_y}, \\ &= 0. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Este resultado muestra la importancia de haber incluido el efecto de las rotaciones locales en el procedimiento para pasar del hamiltoniano uniforme (5.8), por medio de (5.1), al hamiltoniano no uniforme (5.9). Si el tensor de rotaciones  $\bar{\boldsymbol{\omega}}(\mathbf{r})$  no se hubiera tomado en cuenta, hubiésemos llegado a la conclusión errónea que el potencial pseudovectorial dependería de las coordenadas de  $\mathbf{K}_+$ , como inicialmente fue afirmado en [114].

Demostrada la irrelevancia física del término geométrico  $\nabla \times ((\bar{\boldsymbol{\epsilon}}(\mathbf{r}) - \bar{\boldsymbol{\omega}}(\mathbf{r})) \cdot \mathbf{K}_+)$



**Figura 5.1:** (a) Las flechas rojas indican el campo de tensiones requerido para generar la deformación (5.22) en una muestra circular de grafeno. La magnitud de la tensión es indicada por la longitud de la flecha. (b) Campo de tensiones necesario para lograr la deformación (5.22) en una muestra rectangular. (c) (Panel superior) Esquema de una cinta de grafeno de ancho variable bajo una elongación uniaxial, la cual produce un campo pseudomagnético casi uniforme. (Panel inferior) Campo pseudomagnético resultante en la cinta de grafeno mostrada en el panel superior bajo una elongación de 5%, 10% y 15%, respectivamente. Adaptada de [115].

[113], el valor efectivo del campo pseudomagnético está dado por

$$\begin{aligned}
 B &= \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}), \\
 &= \partial_x A_y - \partial_y A_x, \\
 &= \frac{\beta}{2a} (-2\partial_x \bar{\epsilon}_{xy} - \partial_y \bar{\epsilon}_{xx} + \partial_y \bar{\epsilon}_{yy}),
 \end{aligned} \tag{5.21}$$

en unidades de  $\hbar/e$ . Nótese que si hubieramos hecho el análisis alrededor del valle  $\mathbf{K}_D^-$ , el campo pseudomagnético resultaría con signo contrario,  $B = \nabla \times \mathbf{K}_D^-(\mathbf{r}) = -\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})$ .

La naturaleza de estos campos ficticios ofrece la posibilidad de observar cuantización de Landau y efecto Hall cuántico en el grafeno en ausencia de campo magnético real. Para ello se necesitaría inducir una deformación en el grafeno que genere un

campo pseudomagnético uniforme [27, 115, 116]. Entre las primeras propuestas aparecen [27, 116]:

$$u_r = c_0 r^2 \sin 3\theta, \quad u_\theta = c_0 r^2 \cos 3\theta, \quad (5.22)$$

y

$$u_x = c_0(2xy + c_1x), \quad u_y = c_0 \left( -x^2 - \frac{\lambda}{\lambda + 4\mu}(y^2 + c_1y) \right), \quad (5.23)$$

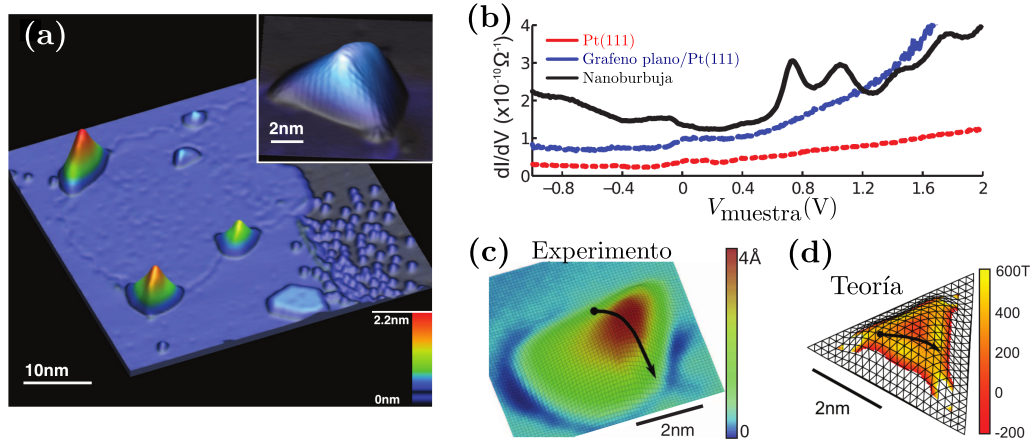
donde  $\lambda$  y  $\mu$  son los coeficientes de Lamé del grafeno. Las estimaciones teóricas de los campos pseudomagnéticos uniformes, asociados a ambas deformaciones, superan los 10 T. Sin embargo, como se muestra en la Figura 5.1, los campos de tensiones necesarios para lograr (5.22) y (5.23) son técnicamente complicados. Recientemente [115], un estudio teórico muestra cómo cortar una cinta de grafeno (en forma de trompeta) de manera que al tirar de los extremos se produzca un campo pseudomagnético casi uniforme en toda la muestra (véase la Figura 5.1 (c)). Este nuevo método posibilita programar la intensidad del campo desde 0 T hasta 200 T en función de la tensión de elongación.

La confirmación experimental de los campos pseudomagnéticos fue inicialmente reportada a través de microscopía de efecto túnel de burbujas de grafeno [28], las cuales se forman cuando este es crecido sobre Pt(111) (véase la Figura 5.2 (a)). Como se ilustra en la Figura 5.2 (b), las mediciones de espectroscopía de efecto túnel (STS por sus siglas en inglés) realizadas directamente sobre las nanoburbujas arrojaron una serie de picos que no se observaron en el espectro STS de otras regiones de la muestra. Tales picos en el espectro STS aparecen en la misma forma cuando el grafeno está sometido a un campo magnético externo [117]. Esto conllevó a que el espectro STS obtenido en [28] fuera interpretado como consecuencia de un campo pseudomagnético asociado a las nanoburbujas. Cuando las deformaciones fuera del plano del grafeno son tomadas en cuenta, el tensor de deformaciones tiene la forma generalizada [118, 119]

$$\bar{\epsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i} + \frac{\partial h}{\partial r_i} \frac{\partial h}{\partial r_j} \right), \quad (5.24)$$

donde  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$  y  $h(\mathbf{r})$  son los desplazamientos en y fuera del plano del grafeno, respectivamente. En el caso de las nanoburbujas, para estimar el campo pseudomagnético





**Figura 5.2:** (a) Imagen STM de grafeno sobre Pt(111) donde se observan 5 nanoburbujas. (Ampliación) Imagen de alta resolución de una de las nanoburbujas que muestra la deformación de la red de panal. (b) Espectros STS de Pt(111), grafeno plano sobre Pt(111) y el centro de una nanoburbuja de grafeno. (c) Topografía STM de una nanoburbuja. (d) Topografía simulada teóricamente de una nanoburbuja con el correspondiente campo pseudomagnético. Adaptada de [28].

por medio de (5.21), el tensor de deformaciones adquiere la expresión simplificada  $\bar{\epsilon}_{ij} = \partial_i h \partial_j h / 2$ . En [28] estimaron campos pseudomagnéticos superiores a los 300 T en las regiones centrales de las nanoburbujas.

Este trabajo inicial estuvo seguido por muchos otros reportes experimentales de pseudocuantización de Landau en muestras de grafeno deformado [120–126] y en otros sistemas como grafeno molecular [75], cristales fotónicos [127] y redes ópticas [128]. Además, campos pseudomagnéticos inducidos por deformaciones elásticas han sido descritos en bicapas de grafeno [129], semiconductores bidimensionales [130–132], aislantes topológicos [133] y semimetales de Weyl tridimensionales [134].

## 5.5. Efectos de una velocidad de Fermi dependiente de la posición

Consideremos ahora los efectos de una velocidad de Fermi dependiente de la posición sobre la función de onda de los portadores de carga. Para este propósito, analicemos el caso de una deformación fuera del plano que depende de la coordenada

$x$  y está dada por  $h(x)$ . Según (5.24) el tensor de deformaciones resulta

$$\tilde{\epsilon}_{xx}(x) = \frac{1}{2}(\partial_x h(x))^2 \equiv f(x)/\beta, \quad \tilde{\epsilon}_{yy} = \tilde{\epsilon}_{xy} = 0, \quad (5.25)$$

de donde inmediatamente se obtiene que  $\mathbf{A} = (f(x)/(2a), 0)$ , mientras que

$$\tilde{\mathbf{v}}(x) = v_F \begin{pmatrix} 1 - f(x) & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{\Gamma} = (-if'(x)/2, 0). \quad (5.26)$$

Si tomamos en cuenta que el campo pseudomagnético es cero, entonces la ecuación de Dirac independiente del tiempo para la función de onda  $\Psi$  puede ser escrita como

$$\begin{aligned} (-i(1 - f(x))\partial_x - \partial_y + if'(x)/2)\psi_2 &= \varepsilon\psi_1, \\ (-i(1 - f(x))\partial_x + \partial_y + if'(x)/2)\psi_1 &= \varepsilon\psi_2, \end{aligned} \quad (5.27)$$

donde el parámetro  $\varepsilon$  es definido como  $\varepsilon \equiv E/(\hbar v_F)$  y  $E$  es la energía.

Dada la homogeneidad espacial en la dirección  $y$ , supondremos que la función de onda es de la forma  $\Psi = \exp(ik_y y)\Phi(\mathbf{x})$ . En consecuencia, (5.27) se reduce a

$$\begin{aligned} ((1 - f(x))\partial_x + k_y - f'(x)/2)\phi_2 &= i\varepsilon\phi_1, \\ ((1 - f(x))\partial_x - k_y - f'(x)/2)\phi_1 &= i\varepsilon\phi_2. \end{aligned} \quad (5.28)$$

En aras de reproducir la solución del grafeno prístino, hagamos la siguiente propuesta:

$$\Phi(x) = \exp\left[\int^x \frac{ik_x + f'(\tilde{x})/2}{1 - f(\tilde{x})} d\tilde{x}\right] \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \quad (5.29)$$

donde  $c_1$  y  $c_2$  son constantes arbitrarias. Por lo tanto, el sistema diferencial (5.28) se transforma en el sistema algebraico

$$\begin{aligned} (ik_x + k_y)c_2 &= i\varepsilon c_1, \\ (ik_x - k_y)c_1 &= i\varepsilon c_2, \end{aligned} \quad (5.30)$$

el cual tiene solución si  $\varepsilon = \pm(k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$ . Como resultado final encontramos que las

autofunciones de la ecuación estacionaria de Dirac (5.27) son de la forma [81]

$$\Psi(\mathbf{r}) = A \exp\left[ik_y y + ik_x \int^x \frac{d\tilde{x}}{1 - f(\tilde{x})}\right] (1 - f(x))^{-1/2} \begin{pmatrix} 1 \\ s e^{i\theta} \end{pmatrix} \quad (5.31)$$

donde  $e^{i\theta} = (k_x + ik_y)/|\varepsilon|$ ,  $A$  es una constante de normalización y  $s = \pm 1$  denota a la bandas de conducción y de valencia, respectivamente.

Dos importantes conclusiones se desprenden de nuestra solución (5.31). Primero, se puede afirmar que una velocidad de Fermi dependiente de la posición no induce brechas energéticas en el espectro de energía como fue reportado previamente en [135]. Segundo,

$$|\Psi|^2 \sim (1 - f(x))^{-1}, \quad (5.32)$$

es decir, una velocidad de Fermi dependiente de la posición produce una inhomogeneidad en la densidad de probabilidad de los portadores de carga. Como ejemplo citemos el interesante caso de un modo flexural dado por  $h(x) = h_0 \cos(Gx)$ . Entonces, de (5.32) obtenemos que  $|\Psi|^2 \sim (1 - \tilde{h} \sin^2(Gx))^{-1}$ , donde  $\tilde{h} = \beta h_0^2 G^2 / 2$ . Por tanto, la densidad de probabilidad de los portadores es mínima en los valles y en las crestas del modo flexural.

Señalemos que los efectos discutidos pueden ser fácilmente aplicados si consideramos una deformación en el plano de la forma  $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = (u(x), 0)$ , ya que en este caso la ecuación de Dirac independiente del tiempo coincidiría con (5.27).



## Deformaciones dependientes del tiempo

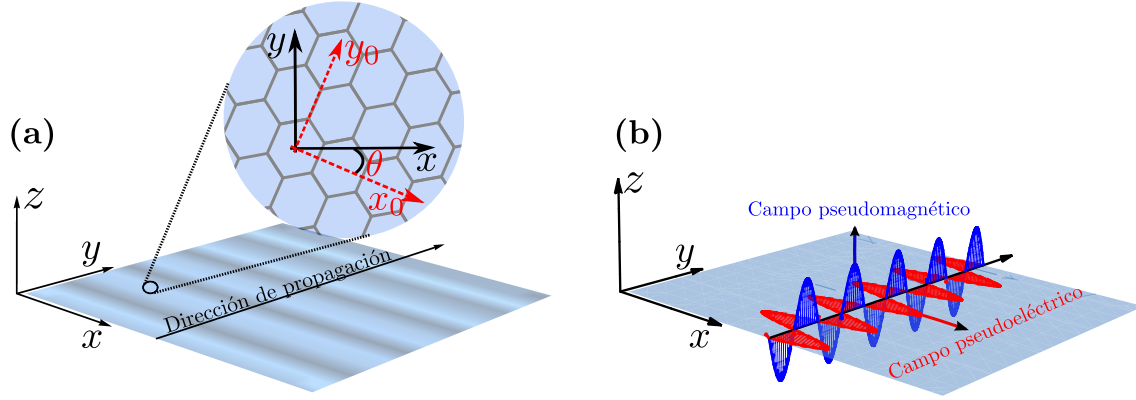
### 6.1. Grafeno bajo una onda de deformación

Consideremos que el grafeno está sometido a un campo de deformación  $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$  dependiente de la posición y del tiempo, el cual es descrito por

$$\mathbf{u} = (0, u_0 \cos(Gy - \omega t)), \quad (6.1)$$

con  $u_0 \ll a \ll 2\pi/G$ . Esta condición garantiza que el desplazamiento atómico  $u_0$  es mucho menor que la distancia  $a$  entre átomos de carbono y que la longitud de onda  $2\pi/G$  es mucho mayor que  $a$ . La onda de deformación (6.1) (u onda de sonido) se propaga a lo largo del eje  $y$  del sistema coordenado  $xy$ , el cual está rotado un ángulo  $\theta$  con respecto al sistema coordenado cristalino  $x_0y_0$  (véase la Figura 6.1 (a)). De este modo, para  $\theta = 2\pi n/3$  la onda de deformación se mueve a lo largo de una dirección *armchair* de la muestra del grafeno, mientras que, para  $\theta = \pi/2 + 2\pi n/3$  la onda mecánica se mueve a lo largo de una dirección *zigzag*. La velocidad de propagación de la onda  $v_s = \omega/G \approx 2 \times 10^4$  m/s se ha asumido igual a la velocidad del sonido en el grafeno [136].

Como fue discutido en la sección anterior, las consecuencias sobre las propiedades electrónicas de una deformación no uniforme pueden ser capturadas a través del



**Figura 6.1:** (a) Esquema de una onda de deformación (onda de sonido) en una muestra de grafeno. Las regiones oscuras representan zonas de mayor densidad de átomos de carbono. En la ampliación se muestra la relación espacial entre el sistema coordenado  $xy$  y el sistema cristalino  $x_0y_0$ . (b) El grafeno bajo una onda pseudoelectromagnética. El campo pseudoeléctrico oscila en el plano del grafeno, mientras el campo pseudomagnético es perpendicular a este. Adaptada de [137].

potencial pseudovectorial  $\mathbf{A}$ , el cual está dado por

$$\begin{aligned} A_x &= \frac{\beta}{2a} \left( (u_{xx} - u_{yy}) \cos 3\theta - 2u_{xy} \sin 3\theta \right), \\ A_y &= \frac{\beta}{2a} \left( -2u_{xy} \cos 3\theta - (u_{xx} - u_{yy}) \sin 3\theta \right), \end{aligned} \quad (6.2)$$

respecto al sistema rotado  $xy$  [138, 139]. Entonces, la onda de deformación (6.1) conduce al potencial pseudovectorial

$$\mathbf{A} = \frac{\beta u_0 G}{2a} \sin(Gy - \omega t) \left( \cos 3\theta, -\sin 3\theta \right), \quad (6.3)$$

que representa una peculiar onda pseudoelectromagnética propagándose a lo largo del eje  $y$ , con la velocidad  $v_s$ . Aquí el campo pseudomagnético asociado  $B_z = \partial_x A_y - \partial_y A_x$  oscila perpendicularmente a la muestra del grafeno, como se muestra en la Figura 6.1 (b). A la misma vez, el campo pseudoeléctrico  $\mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{A}$  oscila en el mismo plano del grafeno pero, en general, no es perpendicular a la dirección de propagación de la onda de deformación. Por ejemplo, para  $\theta = \pi/2 + 2n\pi/3$ , cuando la onda de deformación se mueve a lo largo de la dirección *zigzag*, el campo pseudoeléctrico

oscila paralelo a la dirección de propagación de la onda pseudoelectromagnética. Por tanto, para  $\theta = \pi/2 + 2n\pi/3$  la onda pseudoelectromagnética (6.3) tiene más bien un carácter longitudinal, típico de una onda mecánica. Además, nótese que en este caso el campo pseudomagnético es cero. En cambio, para  $\theta = 2n\pi/3$ , cuando la onda de deformación viaja a lo largo de la dirección *armchair*, el campo pseudoeléctrico oscila transversalmente a la dirección de propagación, como se espera de una onda electromagnética.

Ahora, incluyendo el potencial pseudovectorial (6.3) a través de la sustitución de Peierls, la ecuación efectiva de Dirac, que describe las excitaciones electrónicas de baja energía del grafeno bajo el campo de deformación (6.1), resulta

$$\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (-i\nabla - \mathbf{A})\Psi = i\hbar\partial_t\Psi. \quad (6.4)$$

## 6.2. Estados tipo Volkov

En (6.3), claramente se puede distinguir la periodicidad en el tiempo del potencial  $\mathbf{A}$ . Por tanto, se podría pensar en emplear la teoría de Floquet para estudiar hamiltonianos periódicos en el tiempo [140]. Igualmente,  $\mathbf{A}$  presenta periodicidad espacial a lo largo de la dirección  $y$ , así que, la teoría de Bloch (Floquet) también podría ser usada en la variable espacial. Sin embargo, ya que  $\mathbf{A}$  depende esencialmente de la fase de la onda  $\phi = Gy - \omega t$ , para resolver (6.4), el espinor  $\Psi$  se puede proponer como [141]

$$\Psi(x, y, t) = \exp[i(k_x x + k_y y - Et/\hbar)]\Phi(\phi), \quad (6.5)$$

y entonces, el análisis de Floquet se podría trasladar a la ecuación resultante para el espinor  $\Phi(\phi)$ , como se llevó a cabo en [142]. En principio,  $\{E, k_x, k_y\}$  solo son parámetros de la propuesta (6.5), pero en aras de recobrar la solución (2.13) para un electrón en el grafeno prístino, que se obtiene cuando  $u_0 \rightarrow 0$ , se asumirá que  $E = \pm\hbar v_F(k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$  [142–144].

Un propuesta análoga a (6.5) fue primeramente usada por Volkov al resolver de manera exacta la ecuación de Dirac tridimensional para fermiones relativistas bajo una onda electromagnética en el vacío [141]. De este problema es importante enfatizar que solo en el caso que la onda electromagnética se propague en el vacío

es posible encontrar en forma analítica y sencilla las soluciones de la ecuación de Dirac [144, 145]. Estas soluciones en el vacío son los llamados estados de Volkov y son obtenidos en el Apéndice A en el caso bidimensional. Cuando se considera la interacción de fermiones relativistas con una onda electromagnética que viaja en un medio con índice de refracción  $n_m \neq 1$ , la complejidad matemática de la solución de la ecuación de Dirac aumenta considerablemente. Este problema tiene una larga historia y aún hoy en día sigue siendo objeto de interés [146, 147].

Comparando nuestro problema, dado por (6.3) y (6.4), con el problema clásico de fermiones relativistas bajo una onda electromagnética en un medio de índice de refracción  $n_m$ , se reconoce la siguiente analogía. La velocidad de Fermi  $v_F$  desempeña el papel de la velocidad de la luz  $c$  en el vacío, mientras la velocidad de la onda de deformación  $v_s$  juega el papel de la velocidad de la onda electromagnética  $c/n_m$  en el medio. Por tanto, en el problema considerado aquí puede entenderse como que la onda pseudomagnética se propaga en un medio efectivo con índice de refracción  $n_m = v_F/v_s > 1$ . Este problema difiere del caso del grafeno bajo una onda electromagnética real donde  $n_m = v_F/c < 1$  [148]. Solamente en el caso hipotético que  $v_F = v_s$  se obtendrían los estados de Volkov clásicos (véase el Apéndice A).

Al sustituir (6.5) en (6.4) y tomar en cuenta que  $v_F \gg v_s$ , se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales para las componentes del espinor  $\Phi(\phi)$

$$\begin{aligned} \frac{d\Phi_B}{d\phi} &= (\tilde{k}_x - \tilde{A}_0 \cos 3\theta \sin \phi - i\tilde{k}_y - i\tilde{A}_0 \sin 3\theta \sin \phi)\Phi_B - \tilde{E}\Phi_A \\ -\frac{d\Phi_A}{d\phi} &= (\tilde{k}_x - \tilde{A}_0 \cos 3\theta \sin \phi + i\tilde{k}_y + i\tilde{A}_0 \sin 3\theta \sin \phi)\Phi_A - \tilde{E}\Phi_B, \end{aligned} \quad (6.6)$$

donde  $\tilde{k}_{x,y} = k_{x,y}/G$ ,  $\tilde{A}_0 = \beta u_0/(2a)$  y  $\tilde{E} = E/(\hbar v_F G)$  son cantidades adimensionales. Para simplificar (6.6) es conveniente proponer que

$$\begin{aligned} \Phi(\phi) &= \exp\left[\int^\phi (-i\tilde{k}_y - i\tilde{A}_0 \sin 3\theta \sin \phi^*)d\phi^*\right]\Gamma(\phi) \\ &= \exp[-i\tilde{k}_y\phi + i\tilde{A}_0 \sin 3\theta \cos \phi]\Gamma(\phi), \end{aligned} \quad (6.7)$$



y entonces, resulta el sistema diferencial

$$\begin{aligned}\frac{d\Gamma_B}{d\phi} &= (\tilde{k}_x - \tilde{A}_0 \cos 3\theta \sin \phi)\Gamma_B - \tilde{E}\Gamma_A \\ -\frac{d\Gamma_A}{d\phi} &= (\tilde{k}_x - \tilde{A}_0 \cos 3\theta \sin \phi)\Gamma_A - \tilde{E}\Gamma_B,\end{aligned}\quad (6.8)$$

para las componentes del espinor  $\Gamma(\phi)$ . Ahora, tomando segundas derivadas en el último sistema se puede demostrar que ambas componentes,  $\Gamma_A$  y  $\Gamma_B$ , satisfacen

$$\frac{d^2\Gamma_{A,B}}{d\phi^2} + [\tilde{E}^2 - \tilde{A}_0 \cos 3\theta \cos \phi - (\tilde{k}_x - \tilde{A}_0 \cos 3\theta \sin \phi)^2]\Gamma_{A,B} = 0, \quad (6.9)$$

que es una ecuación tipo Hill. Sin embargo, puesto que en nuestro problema  $\tilde{A}_0 = \beta u_0/(2a) \ll 1$ , los términos de segundo orden en  $\tilde{A}_0$  pueden ser despreciados, y tomando en cuenta que  $\tilde{k}_y^2 = \tilde{E}^2 - \tilde{k}_x^2$ , la expresión (6.9) se reduce a

$$\frac{d^2\Gamma_{A,B}}{d\phi^2} + [\tilde{k}_y^2 - \tilde{A}_0 \sqrt{1 + 4\tilde{k}_x^2} \cos 3\theta \cos(\phi + \phi_0)]\Gamma_{A,B} = 0,$$

donde  $\tan \phi_0 = 2\tilde{k}_x$ . Finalmente, si se introduce el cambio de variable

$$\zeta = (\phi + \phi_0)/2, \quad (6.10)$$

y se definen los parámetros

$$\tilde{a} = 4\tilde{k}_y^2, \quad \tilde{q} = 2\tilde{A}_0(1 + 4\tilde{k}_x^2)^{1/2} \cos 3\theta, \quad (6.11)$$

la ecuación (6.10) puede ser reescrita como

$$\frac{d^2\Gamma_{A,B}}{d\zeta^2} + (\tilde{a} - 2\tilde{q} \cos \zeta)\Gamma_{A,B} = 0, \quad (6.12)$$

que es la forma canónica de la ecuación de Mathieu [149].

En consecuencia, las soluciones generales de las componentes  $\Gamma_A$  y  $\Gamma_B$  pueden ser dadas como combinaciones lineales de las funciones coseno de Mathieu  $C(\tilde{a}, \tilde{q}, \zeta)$  y seno de Mathieu  $S(\tilde{a}, \tilde{q}, \zeta)$ . Si además se considera que al “apagar” el campo pseudo-

electromagnético ( $\tilde{A}_0 = 0$ ) el espinor  $\Psi$  debe reproducir el espinor de partícula libre (2.13), entonces la solución de (6.12) resulta

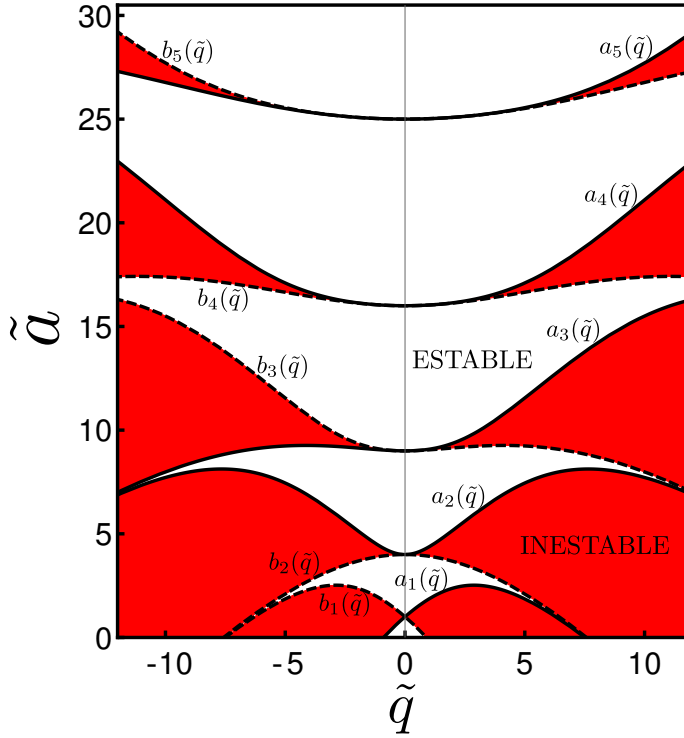
$$\Gamma(\zeta) = N(C(\tilde{a}, \tilde{q}, \zeta) + iS(\tilde{a}, \tilde{q}, \zeta)) \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\vartheta} \end{pmatrix}, \quad (6.13)$$

donde  $\vartheta = \tan(\tilde{k}_y/\tilde{k}_x)$ ,  $N$  es una constante de normalización y  $s = \pm 1$  denota a la banda de conducción y la banda de valencia, respectivamente.

### 6.3. Efectos de la onda de deformación

Como es bien documentado en [149, 150], la estabilidad de las funciones de Mathieu dependen de los parámetros  $\tilde{q}$  y  $\tilde{a}$ . En la Figura 6.2, las regiones rojas en el plano  $(\tilde{q}, \tilde{a})$  corresponden con funciones de Mathieu no estables, ya que se comportan como exponenciales con argumentos reales. En consecuencia, la funciones de Mathieu para estos valores de  $(\tilde{q}, \tilde{a})$  no son aceptables desde un punto de vista físico. En cambio, a las regiones blancas en la Figura 6.2 le corresponden funciones de Mathieu estables y, por tanto, son apropiadas funciones de onda. Las fronteras entre estas regiones están determinadas por los autovalores  $a_n(\tilde{q})$  y  $b_n(\tilde{q})$ , correspondientes a las funciones de Mathieu de periodo  $2\pi$  (de orden entero),  $ce_n(\tilde{q}, \zeta)$  y  $se_n(q, \zeta)$ , respectivamente [149, 150].

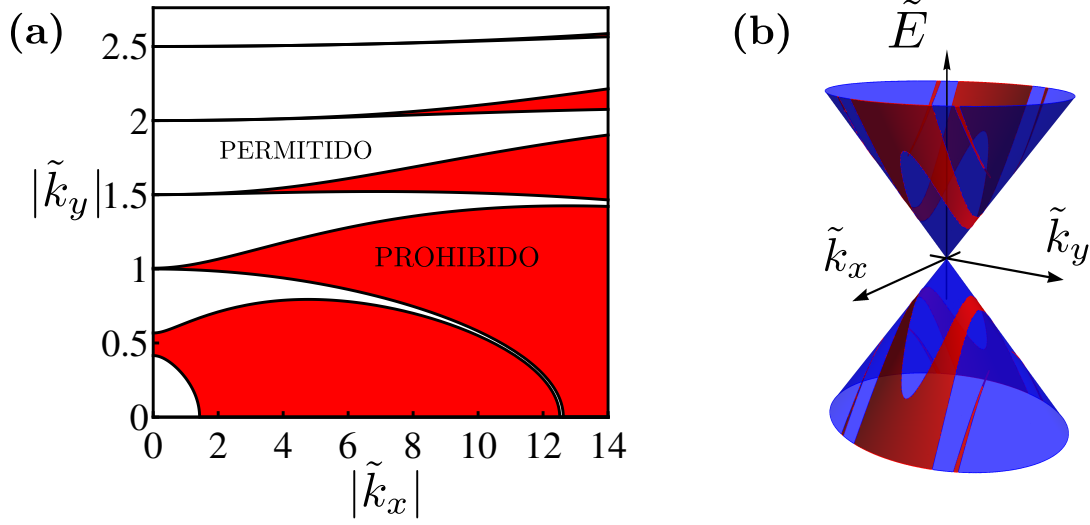
Como una consecuencia de las propiedades mencionadas de las funciones de Mathieu, una “estructura de bandas” emerge en nuestro problema. Considerando (6.11), el mapa de estabilidad en el plano  $(\tilde{q}, \tilde{a})$  puede ser trasladado a un mapa de bandas permitidas (y prohibidas) en el plano  $(\tilde{k}_x, \tilde{k}_y)$ , como se muestra en la Figura 6.3 (a). Cuando la onda de deformación se propaga a lo largo de la dirección *zigzag* se tiene que  $\cos 3\theta = 0$ , entonces  $\tilde{q} = 0$  y, por tanto, el cuasivector de onda  $\tilde{\mathbf{k}} = (\tilde{k}_x, \tilde{k}_y)$  del electrón puede tomar cualquier valor. Sin embargo, cuando la onda se propaga en la dirección *armchair* se tiene que  $\cos 3\theta = \pm 1$  y dada la dependencia  $\tilde{q} \sim \cos 3\theta$ , entonces el parámetro  $\tilde{q}$  tiene mayor módulo. De la Figura 6.2 puede apreciarse que mientras mayor es el módulo de  $\tilde{q}$  más amplios son los intervalos de inestabilidad, lo que se traduce en un conjunto mayor de cuasivectores de onda  $\tilde{\mathbf{k}} = (\tilde{k}_x, \tilde{k}_y)$  prohibidos.



**Figura 6.2:** Mapa de estabilidad en función de los parámetros  $\tilde{a}$  y  $\tilde{q}$  para las funciones de Mathieu. Las regiones de estabilidad (dominios blancos) y de inestabilidad (dominios rojos) están divididas por las curvas características  $a_n(q)$  (curvas continuas) y  $b_n(q)$  (curvas discontinuas). El mapa es simétrico respecto al eje  $\tilde{a}$ .

En la Figura 6.3 (a) se muestran los valores permitidos y prohibidos del cuasivector de onda  $\tilde{\mathbf{k}} = (\tilde{k}_x, \tilde{k}_y)$  de los portadores de carga cuando una onda de amplitud  $u_0 = 0.1a$  viaja en la dirección *armchair*. El resultado más importante a notar en la Figura 6.3 (a) es que los portadores de carga se propagan preferencialmente en la dirección  $y$ , que es la dirección de propagación de la onda. De este modo, la onda de deformación produce un efecto de colimación en la propagación de los portadores. Mostremos más explícitamente este hecho. Por ejemplo, si  $\tilde{k}_y = 0$ , los valores permitidos de  $\tilde{k}_x$  están prácticamente limitados al intervalo  $(-\tilde{q}_c/4\tilde{A}_0, \tilde{q}_c/4\tilde{A}_0)$ , donde  $b_1(\tilde{q}_c \approx 0.91) = 0$ . En otras palabras, solo los portadores de muy baja energía se propagan perpendicularmente a la dirección en la que viaja la onda de sonido. Por el contrario, si  $\tilde{k}_x = 0$ ,  $|\tilde{k}_y|$  puede tomar casi todos los valores excepto los semienteros positivos, como puede apreciarse en la Figura 6.3 (a). Este último resultado es una condición análoga a la difracción de Bragg [150].

Los valores prohibidos del cuasivector de onda  $\tilde{\mathbf{k}}$  dividen al cono de Dirac, dado por  $\tilde{E} = \pm(\tilde{k}_x^2 + \tilde{k}_y^2)^{1/2}$ , en bandas prohibidas y permitidas de la cuasienergía  $\tilde{E}$ , como se grafica en la Figura 6.3 (b). Resultados similares han sido discutidos para



**Figura 6.3:** (a) Valores permitidos (bandas blancas) y prohibidos (bandas rojas) del cuasivector de onda  $\tilde{\mathbf{k}} = (\tilde{k}_x, \tilde{k}_y)$  para los portadores de carga en el grafeno bajo una onda de deformación (6.1) con  $A_0 = 0.15$  y  $\theta = 0$ . (b) Cono de Dirac modificado por la presencia de la onda de deformación. Las bandas azules (rojas) corresponden a los valores permitidos (prohibidos) de la cuasienergía  $\tilde{E}(\tilde{k}_x, \tilde{k}_y)$ .

partículas relativistas descritas por la ecuación de Klein-Gordon bajo una onda electromagnética plana que viaja en un medio con  $n_m > 1$  [142, 143]. Por otra parte, los resultados obtenidos aquí difieren de los reportados para el caso del grafeno bajo una onda electromagnética que viaja a la velocidad de la luz en el vacío  $c \approx 300v_F$  [148]. La razón física es simple. En el caso electromagnético [148], al ser la velocidad de la onda mucho mayor que la velocidad de Fermi conlleva a que los efectos eléctricos predominen frente a los efectos magnéticos. Sin embargo, en nuestro problema la onda pseudoelectromagnética se propaga a la velocidad del sonido  $v_s \approx v_F/40$  y al ser mucho menor que la velocidad de Fermi, los efectos pseudomagnéticos predominan sobre los efectos pseudoeléctricos.

Finalmente es importante notar en la Figura 6.3 (b) que no aparece una brecha energética en el cono de Dirac producto de la onda de deformación. Puede apreciarse que para cualquier valor de la cuasienergía  $\tilde{E}$ , siempre se tienen valores del cuasivector de onda  $\tilde{\mathbf{k}}$  tal que  $\tilde{E} = \pm(\tilde{k}_x^2 + \tilde{k}_y^2)^{1/2}$ . Esto es un hecho muy importante si pensamos en el transporte de carga debido a ondas de deformación. Recientemente se reportó la posibilidad de observar en el grafeno corrientes netas debidas a defor-

maciones dependientes del tiempo [151]. Para lograr tal corriente neta de carga la presencia de la brecha energética es un ingrediente esencial. Por tanto, bajo la aproximación usada no es posible lograr una corriente neta de carga debida a una onda de deformación [152]. Este hecho puede ser además justificado mediante un argumento sencillo: el campo pseudoelectromagnético se acopla con signos diferentes en los valles,  $\mathbf{K}_D^+$  y  $\mathbf{K}_D^-$ , con diferentes índices de valle. En consecuencia, las corrientes de los valles  $\mathbf{K}_D^+$  y  $\mathbf{K}_D^-$  fluyen en direcciones contrarias de tal modo que se cancelan y, por tanto, no hay corriente neta de carga.



## Conclusiones

En esta tesis doctoral hemos estudiado la descripción a baja energía (el hamiltoniano efectivo de Dirac) del grafeno deformado tomando como punto de partida la aproximación de amarre fuerte a primeros vecinos. Además, hemos evaluado los efectos de las deformaciones sobre las propiedades ópticas del grafeno. Las principales contribuciones del presente trabajo son:

- 1) Derivamos el hamiltoniano efectivo de Dirac de redes bidimensionales hexagonales (en forma de panal) ligeramente anisotrópicas [84]. Un punto central en nuestra derivación resultó la consideración del corrimiento de los puntos de Dirac respecto a las esquinas de la primera zona de Brillouin, el cual es un efecto debido a las diferencias entre las integrales de salto a los tres primeros vecinos.
- 2) Obtuvimos el hamiltoniano efectivo de Dirac para el grafeno deformado uniformemente a primer orden en el tensor de deformaciones [80]. Tres efectos debidos a la deformación uniforme fueron tomados en cuenta: la deformación de los vectores base de la red, el cambio en las integrales de salto y el corrimiento de los puntos de Dirac. Además, comparamos nuestro tensor velocidad de Fermi con otros previamente reportados en la literatura [46, 107] y mostramos que estos últimos presentan inconsistencias.
- 3) La conductividad óptica de sistemas de Dirac anisotrópicos fue calculada [84]. Como aplicación de este resultado general, obtuvimos de manera analítica la

- conductividad óptica del grafeno deformado uniformemente a primer orden en el tensor de deformaciones [102, 103]. Nuestras expresiones generalizan las expresiones previamente reportadas para el caso del grafeno bajo una deformación uniaxial [29].
- 4) Para sistemas de Dirac anisotrópicos mostramos cómo una absorción óptica anisotrópica conlleva a una modulación de la transmitancia y del dichroísmo en función de la polarización de la onda electromagnética incidente [84]. Las expresiones generales obtenidas las aplicamos al caso del grafeno deformado uniformemente y calculamos analíticamente la transmitancia y el dichroísmo, a primer orden en el tensor de deformaciones [104]. Nuestros resultados teóricos generalizan expresiones previas para el caso del grafeno bajo una deformación uniaxial [29] y explican de forma más general resultados experimentales recientes [30].
  - 5) Construimos un hamiltoniano efectivo de Dirac para el grafeno bajo deformaciones no uniformes a partir del hamiltoniano del caso uniforme [81]. En nuestro enfoque los campos pseudomagnéticos aparecen como consecuencia del corrimiento de los puntos de Dirac. Además, pudimos mostrar explícita y analíticamente los efectos de una velocidad de Fermi dependiente de la posición sobre las funciones de onda de los portadores de carga [81].
  - 6) Estudiamos los efectos de una onda de sonido sobre el movimiento de los portadores de carga en el grafeno [137]. Como solución de la ecuación efectiva de Dirac encontramos que la onda de deformación genera estados tipo Volkov, los cuales se propagan preferentemente en la dirección de propagación de la deformación. Además, reportamos una estructura de bandas de valores permitidos y prohibidos para el cuasivector de onda y la cuasienergía. La forma de la estructura de bandas emergente depende de la dirección de propagación de la onda de sonido respecto a las direcciones cristalinas del grafeno. Este hecho produce un efecto de colimación sobre el movimiento de los portadores de carga.



## Estados de Volkov

Supongamos que el grafeno prístino es sometido a una “onda electromagnética plana” dada por el potencial vectorial  $\mathbf{A} = (A_0(\varphi), 0)$ , donde  $\varphi = Gy - \omega t$ . En este caso la dinámica de los portadores de carga es descrita por la ecuación de Dirac

$$v_F \{ \sigma_x (-i\hbar \partial_x - eA_0(\varphi)) - i\hbar \sigma_y \partial_y \} \Psi = i\hbar \partial_t \Psi. \quad (\text{A.1})$$

Haciendo la propuesta de Volkov [141]

$$\Psi(x, y, t) = \exp[i(k_x x + k_y y - Et/\hbar)] \Phi(\varphi), \quad (\text{A.2})$$

entonces (A.1) se transforma en

$$\{ v_F \sigma_x (\hbar k_x - eA_0(\varphi)) + \hbar v_F \sigma_y k_y - E \} \Phi = i\hbar (v_F G \sigma_y - \omega) \frac{d\Phi}{d\varphi}. \quad (\text{A.3})$$

Señalemos tres casos de interés:

1.  $v_F = \omega/G$ , este es el caso estándar de Volkov en que las partículas relativistas tienen la misma velocidad que la “onda electromagnética” y tiene solución exacta: los estados de Volkov.
2.  $v_F \gg \omega/G$ , este caso es el discutido en el Capítulo 6, donde la velocidad de las partículas  $v_F$  es mucho mayor que la velocidad de la onda pseudoelectromagnética  $v_s = \omega/G$  asociada a la onda de deformación.

3.  $v_F \ll \omega/G$ , este es el caso electromagnético resuelto en [148], donde la velocidad de las partículas  $v_F$  es mucho menor que la velocidad de la luz  $c = \omega/G$  a la que viaja la onda electromagnética en el vacío.

Consideremos ahora el problema estándar de Volkov, para el cual  $v_F = \omega/G$ . Producto de que  $\sigma_y$  mezcla las derivadas en el lado derecho del sistema (A.3) podemos proponer una transformación unitaria para diagonalizarlo. Siguiendo a Majorana, introduzcamos la transformación unitaria [153]

$$u_M = (\sigma_y + \sigma_z)/\sqrt{2}, \quad (\text{A.4})$$

para la cual se cumple

$$u_M = u_M^{-1} = u_M^\dagger, \quad u_M \sigma_x u_M^{-1} = -\sigma_x, \quad u_M \sigma_y u_M^{-1} = \sigma_z. \quad (\text{A.5})$$

En consecuencia, en la representación de Majorana (A.3) se transforma en

$$\{-v_F \sigma_x (\hbar k_x - eA_0(\varphi)) + v_F \sigma_z \hbar k_y - E\} \mathbf{F} = i\hbar(v_F G \sigma_z - \omega) \frac{d\mathbf{F}}{d\varphi}. \quad (\text{A.6})$$

donde  $\mathbf{F} = u_M \Phi$ . Si ahora reescribimos (A.6) por componentes y tomamos en cuenta que  $v_F G = \omega$  resulta

$$-v_F (\hbar k_x - eA_0(\varphi)) f_2 + (\hbar v_F k_y - E) f_1 = 0, \quad (\text{A.7})$$

$$-v_F (\hbar k_x - eA_0(\varphi)) f_1 - (\hbar v_F k_y + E) f_2 = -i\hbar(v_F G + \omega) \frac{df_2}{d\varphi}. \quad (\text{A.8})$$

Inmediatamente, de (A.7) se tiene que

$$f_1 = \frac{v_F (\hbar k_x - eA_0(\varphi))}{\hbar v_F k_y - E} f_2, \quad (\text{A.9})$$

y sustituyendo esta expresión en (A.8) se obtiene

$$\frac{df_2}{d\varphi} = \frac{i(E^2 - \hbar^2 v_F^2 k_y^2 - v_F^2 (\hbar k_x - eA_0(\varphi))^2)}{2\hbar\omega(\hbar v_F k_y - E)}. \quad (\text{A.10})$$

Por tanto, el espinor  $\mathbf{F}(\varphi)$  está dado por

$$\mathbf{F}(\varphi) = C \begin{pmatrix} \frac{v_F(\hbar k_x - eA_0(\varphi))}{\hbar v_F k_y - E} \\ 1 \end{pmatrix} \exp \int^\varphi \frac{i(E^2 - \hbar^2 v_F^2 k_y^2 - v_F^2 (\hbar k_x - eA_0(\tilde{\varphi}))^2)}{2\hbar\omega(\hbar v_F k_y - E)} d\tilde{\varphi}, \quad (\text{A.11})$$

y, en consecuencia, el espinor  $\Phi(\varphi)$  resulta igual a

$$\begin{aligned} \Phi &= u_M \mathbf{F} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} f_1 & -if_2 \\ if_1 & -f_2 \end{pmatrix}, \\ &= \frac{C}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{v_F(\hbar k_x - eA_0(\varphi)) - i(\hbar v_F k_y - E)}{\hbar v_F k_y - E} \\ \frac{i v_F(\hbar k_x - eA_0(\varphi)) - (\hbar v_F k_y - E)}{\hbar v_F k_y - E} \end{pmatrix} \exp \int^\varphi \frac{i(E^2 - \hbar^2 v_F^2 k_y^2 - v_F^2 (\hbar k_x - eA_0(\tilde{\varphi}))^2)}{2\hbar\omega(\hbar v_F k_y - E)} d\tilde{\varphi}. \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Finalmente la solución (de Volkov) a la ecuación (A.1) es

$$\Psi(x, y, t) = \exp[i(k_x x + k_y y - Et/\hbar)] \Phi(\varphi), \quad (\text{A.13})$$

con  $\Phi(\varphi)$  dado por (A.12).

Hasta aquí no ha salido como parte de la solución de (A.1) una relación de dispersión. Si ahora exigimos que la solución (A.13), para  $A_0 \rightarrow 0$ , reproduzca la solución del grafeno sin campo, entonces debemos exigir que  $E^2 = \hbar^2 v_F^2 (k_x^2 + k_y^2)$ .



---

## Referencias

- [1] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, and R. E. Smalley, *C60: Buckminsterfullerene*, *Nature* **318**, 162 (1985).
- [2] S. Iijima, *Helical microtubules of graphitic carbon*, *Nature* **354**, 56 (1991).
- [3] N. D. Mermin, *Crystalline Order in Two Dimensions*, *Phys. Rev.* **176**, 250 (1968).
- [4] H. P. Boehm, A. Clauss, G. O. Fischer, and U. Hofmann, *Das Adsorptionsverhalten sehr dünner Kohlenstoff-Folien*, *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie* **316**, 119 (1962).
- [5] K. S. Novoselov et al., *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*, *Science* **306**, 666 (2004).
- [6] K. S. Novoselov et al., *Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene*, *Nature* **438**, 197 (2005).
- [7] A. Fasolino, J. H. Los, and M. I. Katsnelson, *Intrinsic ripples in graphene*, *Nat Mater* **6**, 858 (2007).
- [8] K. I. Bolotin et al., *Ultrahigh electron mobility in suspended graphene*, *Solid State Communications* **146**, 351 (2008).

- 
- [9] X. Du, I. Skachko, A. Barker, and E. Y. Andrei, *Approaching ballistic transport in suspended graphene*, *Nat Nano* **3**, 491 (2008).
- [10] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, *Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene*, *Science* **321**, 385 (2008).
- [11] K. S. Kim et al., *Large-scale pattern growth of graphene films for stretchable transparent electrodes*, *Nature* **457**, 706 (2009).
- [12] D. C. Elias et al., *Control of Graphene's Properties by Reversible Hydrogenation: Evidence for Graphane*, *Science* **323**, 610 (2009).
- [13] X. Wang et al., *N-Doping of Graphene Through Electrothermal Reactions with Ammonia*, *Science* **324**, 768 (2009).
- [14] A. A. Balandin et al., *Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene*, *Nano Letters* **8**, 902 (2008).
- [15] R. R. Nair et al., *Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene*, *Science* **320**, 1308 (2008).
- [16] K. F. Mak et al., *Measurement of the Optical Conductivity of Graphene*, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 196405 (2008).
- [17] A. C. Ferrari et al., *Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems*, *Nanoscale* **7**, 4598 (2015).
- [18] P. R. Wallace, *The Band Theory of Graphite*, *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947).
- [19] J. C. Slonczewski and P. R. Weiss, *Band Structure of Graphite*, *Phys. Rev.* **109**, 272 (1958).
- [20] G. W. Semenoff, *Condensed-Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly*, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2449 (1984).
- [21] F. D. M. Haldane, *Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly"*, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2015 (1988).

- [22] M. I. Katsnelson and K. S. Novoselov, *Graphene: New bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics*, *Solid State Communications* **143**, 3 (2007).
- [23] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene*, *Nat. Phys.* **2**, 620 (2006).
- [24] S. E. Thompson et al., *A logic nanotechnology featuring strained-silicon*, *Electron Device Letters*, *IEEE* **25**, 191 (2004).
- [25] Z. H. Ni et al., *Uniaxial Strain on Graphene: Raman Spectroscopy Study and Band-Gap Opening*, *ACS Nano* **2**, 2301 (2008).
- [26] V. M. Pereira, A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres, *Tight-binding approach to uniaxial strain in graphene*, *Phys. Rev. B* **80**, 045401 (2009).
- [27] F. Guinea, M. I. Katsnelson, and A. K. Geim, *Energy gaps and a zero-field quantum Hall effect in graphene by strain engineering*, *Nat Phys* **6**, 30 (2010).
- [28] N. Levy et al., *Strain-Induced Pseudo-Magnetic Fields Greater Than 300 Tesla in Graphene Nanobubbles*, *Science* **329**, 544 (2010).
- [29] V. M. Pereira, R. M. Ribeiro, N. M. R. Peres, and A. H. Castro Neto, *Optical properties of strained graphene*, *EPL* **92**, 67001 (2010).
- [30] G.-X. Ni et al., *Tuning Optical Conductivity of Large-Scale CVD Graphene by Strain Engineering*, *Advanced Materials* **26**, 1081 (2014).
- [31] M. A. Bissett, S. Konabe, S. Okada, M. Tsuji, and H. Ago, *Enhanced Chemical Reactivity of Graphene Induced by Mechanical Strain*, *ACS Nano* **7**, 10335 (2013).
- [32] S.-E. Zhu, M. Krishna Ghatkesar, C. Zhang, and G. C. A. M. Janssen, *Graphene based piezoresistive pressure sensor*, *Applied Physics Letters* **102**, 161904 (2013).

- 
- [33] P. Kang, M. C. Wang, P. M. Knapp, and S. Nam, *Crumpled Graphene Photodetector with Enhanced, Strain-Tunable, and Wavelength-Selective Photoresponsivity*, *Advanced Materials* **28**, 4639 (2016).
- [34] Z. Jing, Z. Guang-Yu, and S. Dong-Xia, *Review of graphene-based strain sensors*, *Chinese Physics B* **22**, 057701 (2013).
- [35] S.-H. Bae et al., *Graphene-based transparent strain sensor*, *Carbon* **51**, 236 (2013).
- [36] Z. Wang, M. Shaygan, M. Otto, D. Schall, and D. Neumaier, *Flexible Hall sensors based on graphene*, *Nanoscale* **8**, 7683 (2016).
- [37] B. Roy and V. Juričić, *Strain-induced time-reversal odd superconductivity in graphene*, *Phys. Rev. B* **90**, 041413 (2014).
- [38] V. J. Kauppila, F. Aikebaier, and T. T. Heikkilä, *Flat-band superconductivity in strained Dirac materials*, *Phys. Rev. B* **93**, 214505 (2016).
- [39] G. Montambaux, F. Piéchon, J.-N. Fuchs, and M. O. Goerbig, *Merging of Dirac points in a two-dimensional crystal*, *Phys. Rev. B* **80**, 153412 (2009).
- [40] R. de Gail, J.-N. Fuchs, M. Goerbig, F. Piéchon, and G. Montambaux, *Manipulation of Dirac points in graphene-like crystals*, *Physica B: Condensed Matter* **407**, 1948 (2012).
- [41] G. G. Naumis and P. Roman-Taboada, *Mapping of strained graphene into one-dimensional Hamiltonians: Quasicrystals and modulated crystals*, *Phys. Rev. B* **89**, 241404 (2014).
- [42] P. Roman-Taboada and G. G. Naumis, *Spectral butterfly, mixed Dirac-Schrödinger fermion behavior, and topological states in armchair uniaxial strained graphene*, *Phys. Rev. B* **90**, 195435 (2014).
- [43] D. A. Abanin and D. A. Pesin, *Interaction-Induced Topological Insulator States in Strained Graphene*, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 066802 (2012).



- [44] B. Roy and I. F. Herbut, *Topological insulators in strained graphene at weak interaction*, *Phys. Rev. B* **88**, 045425 (2013).
- [45] B. Amorim et al., *Novel effects of strains in graphene and other two dimensional materials*, *Physics Reports* **617**, 1 (2016).
- [46] F. de Juan, M. Sturla, and M. A. H. Vozmediano, *Space Dependent Fermi Velocity in Strained Graphene*, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 227205 (2012).
- [47] R. Kerner, G. G. Naumis, and W. A. Gómez-Arias, *Bending and flexural phonon scattering: Generalized Dirac equation for an electron moving in curved graphene*, *Physica B: Condensed Matter* **407**, 2002 (2012).
- [48] E. Arias, A. R. Hernández, and C. Lewenkopf, *Gauge fields in graphene with nonuniform elastic deformations: A quantum field theory approach*, *Phys. Rev. B* **92**, 245110 (2015).
- [49] J. L. Mañes, *Symmetry-based approach to electron-phonon interactions in graphene*, *Phys. Rev. B* **76**, 045430 (2007).
- [50] R. Winkler and U. Zülicke, *Invariant expansion for the trigonal band structure of graphene*, *Phys. Rev. B* **82**, 245313 (2010).
- [51] J. L. Mañes, F. de Juan, M. Sturla, and M. A. H. Vozmediano, *Generalized effective Hamiltonian for graphene under nonuniform strain*, *Phys. Rev. B* **88**, 155405 (2013).
- [52] J. V. Sloan et al., *Strain gauge fields for rippled graphene membranes under central mechanical load: An approach beyond first-order continuum elasticity*, *Phys. Rev. B* **87**, 155436 (2013).
- [53] S. Barraza-Lopez, A. A. Pacheco Sanjuan, Z. Wang, and M. Vanević, *Strain-engineering of graphene's electronic structure beyond continuum elasticity*, *Solid State Communications* **166**, 70 (2013).
- [54] A. A. Pacheco Sanjuan, M. Mehboudi, E. O. Harriss, H. Terrones, and S. Barraza-Lopez, *Quantitative Chemistry and the Discrete Geometry of Conformal Atom-Thin Crystals*, *ACS Nano* **8**, 1136 (2014).

- [55] A. A. Pacheco Sanjuan, Z. Wang, H. Pour Imani, M. Vanević, and S. Barraza-Lopez, *Graphene's morphology and electronic properties from discrete differential geometry*, *Phys. Rev. B* **89**, 121403 (2014).
- [56] 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 (2009).
- [57] M. A. H. Vozmediano, M. I. Katsnelson, and F. Guinea, *Gauge fields in graphene*, *Physics Reports* **496**, 109 (2010).
- [58] C. Bena and G. Montambaux, *Remarks on the tight-binding model of graphene*, *New J. Phys.* **11**, 095003 (2009).
- [59] D. W. Boukhvalov, M. I. Katsnelson, and A. I. Lichtenstein, *Hydrogen on graphene: Electronic structure, total energy, structural distortions and magnetism from first-principles calculations*, *Phys. Rev. B* **77**, 035427 (2008).
- [60] S. Reich, J. Maultzsch, C. Thomsen, and P. Ordejón, *Tight-binding description of graphene*, *Phys. Rev. B* **66**, 035412 (2002).
- [61] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, *Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene*, *Nature* **438**, 201 (2005).
- [62] P. Marconcini and M. Macucci, *The k.p method and its application to graphene, carbon nanotubes and graphene nanoribbons: The Dirac equation*, *La Rivista del Nuovo Cimento* **34**, 489 (2011).
- [63] J. D. Bjorken and S. D. Drell, *Relativistic Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York, 1964).
- [64] A. Messiah, *Quantum Mechanics* (Dover, New York, 1999).
- [65] O. Klein, *Die Reflexion von Elektronen an einem Potentialsprung nach der relativistischen Dynamik von Dirac*, *Zeitschrift für Physik* **53**, 157 (1929).
- [66] A. Calogeracos and N. Dombey, *History and physics of the Klein paradox*, *Contemporary Physics* **40**, 313 (1999).

- 
- [67] N. Stander, B. Huard, and D. Goldhaber-Gordon, *Evidence for Klein Tunneling in Graphene p-n Junctions*, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 026807 (2009).
- [68] A. F. Young and P. Kim, *Quantum interference and Klein tunnelling in graphene heterojunctions*, *Nat. Phys.* **5**, 222 (2009).
- [69] J. W. McClure, *Diamagnetism of Graphite*, *Phys. Rev.* **104**, 666 (1956).
- [70] V. P. Gusynin and S. G. Sharapov, *Unconventional Integer Quantum Hall Effect in Graphene*, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146801 (2005).
- [71] K. S. Novoselov et al., *Room-Temperature Quantum Hall Effect in Graphene*, *Science* **315**, 1379 (2007).
- [72] L. Foa Torres, S. Roche, and J.-C. Charlier, *Introduction to Graphene-Based Nanomaterials: From Electronic Structure to Quantum Transport* (CUP, 2014).
- [73] M. I. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions* (Cambridge University Press, 2012).
- [74] L. Tarruell, D. Greif, T. Uehlinger, G. Jotzu, and T. Esslinger, *Creating, moving and merging Dirac points with a Fermi gas in a tunable honeycomb lattice*, *Nature* **483**, 302 (2012).
- [75] K. K. Gomes, W. Mar, W. Ko, F. Guinea, and H. C. Manoharan, *Designer Dirac fermions and topological phases in molecular graphene*, *Nature* **483**, 306 (2012).
- [76] M. Polini, F. Guinea, M. Lewenstein, H. C. Manoharan, and V. Pellegrini, *Artificial honeycomb lattices for electrons, atoms and photons*, *Nat. Nano.* **8**, 625 (2013).
- [77] M. Bellec, U. Kuhl, G. Montambaux, and F. Mortessagne, *Topological Transition of Dirac Points in a Microwave Experiment*, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 033902 (2013).
- [78] J. Feilhauer, W. Apel, and L. Schweitzer, *Merging of the Dirac points in electronic artificial graphene*, *Phys. Rev. B* **92**, 245424 (2015).

- 
- [79] Y. Hasegawa, R. Konno, H. Nakano, and M. Kohmoto, *Zero modes of tight-binding electrons on the honeycomb lattice*, *Phys. Rev. B* **74**, 033413 (2006).
- [80] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, *Understanding electron behavior in strained graphene as a reciprocal space distortion*, *Phys. Rev. B* **88**, 085430 (2013).
- [81] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, *Generalizing the Fermi velocity of strained graphene from uniform to nonuniform strain*, *Physics Letters A* **379**, 2645 (2015).
- [82] G. Volovik and M. Zubkov, *Emergent Horava gravity in graphene*, *Annals of Physics* **340**, 352 (2014).
- [83] G. Volovik and M. Zubkov, *Emergent geometry experienced by fermions in graphene in the presence of dislocations*, *Annals of Physics* **356**, 255 (2015).
- [84] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, *Effective Dirac Hamiltonian for anisotropic honeycomb lattices: Optical properties*, *Phys. Rev. B* **93**, 035439 (2016).
- [85] W. A. Gómez-Arias and G. G. Naumis, *Analytical calculation of electron group velocity surfaces in uniform strained graphene*, *International Journal of Modern Physics B* **30**, 1550263 (2016).
- [86] R. M. Ribeiro, V. M. Pereira, N. M. R. Peres, P. R. Briddon, and A. H. Castro Neto, *Strained graphene: tight-binding and density functional calculations*, *New J. Phys.* **11**, 115002 (2009).
- [87] Y. Lu and J. Guo, *Band gap of strained graphene nanoribbons*, *Nano Research* **3**, 189 (2010).
- [88] Y. Li, X. Jiang, Z. Liu, and Z. Liu, *Strain effects in graphene and graphene nanoribbons: The underlying mechanism*, *Nano Research* **3**, 545 (2010).
- [89] K. V. Zakharchenko, M. I. Katsnelson, and A. Fasolino, *Finite Temperature Lattice Properties of Graphene beyond the Quasiharmonic Approximation*, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 046808 (2009).

- 
- [90] T. M. G. Mohiuddin et al., *Uniaxial strain in graphene by Raman spectroscopy: G peak splitting, Grüneisen parameters, and sample orientation*, *Phys. Rev. B* **79**, 205433 (2009).
- [91] I. Polyzos et al., *Suspended monolayer graphene under true uniaxial deformation*, *Nanoscale* **7**, 13033 (2015).
- [92] S.-M. Choi, S.-H. Jhi, and Y.-W. Son, *Effects of strain on electronic properties of graphene*, *Phys. Rev. B* **81**, 081407 (2010).
- [93] R. He et al., *Large Physisorption Strain in Chemical Vapor Deposition of Graphene on Copper Substrates*, *Nano Letters* **12**, 2408 (2012).
- [94] S.-M. Lee et al., *Materialization of strained CVD-graphene using thermal mismatch*, *Nano Research* **8**, 2082 (2015).
- [95] V. P. Gusynin and S. G. Sharapov, *Transport of Dirac quasiparticles in graphene: Hall and optical conductivities*, *Phys. Rev. B* **73**, 245411 (2006).
- [96] V. P. Gusynin, S. G. Sharapov, and J. P. Carbotte, *AC conductivity of graphene: from tight-binding model to 2 + 1-dimensional quantum electrodynamics*, *International Journal of Modern Physics B* **21**, 4611 (2007).
- [97] T. Stauber, N. M. R. Peres, and A. K. Geim, *Optical conductivity of graphene in the visible region of the spectrum*, *Phys. Rev. B* **78**, 085432 (2008).
- [98] K. Ziegler, *Robust Transport Properties in Graphene*, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 266802 (2006).
- [99] K. Ziegler, *Minimal conductivity of graphene: Nonuniversal values from the Kubo formula*, *Phys. Rev. B* **75**, 233407 (2007).
- [100] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 3rd ed. (Wiley, New York, 1999).
- [101] S. McKnight, K. Stewart, H. Drew, and K. Moorjani, *Wavelength-independent anti-interference coating for the far-infrared*, *Infrared Physics* **27**, 327 (1987).
- [102] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, *Anisotropic AC conductivity of strained graphene*, *Journal of Physics: Condensed Matter* **26**, 125302 (2014).

- 
- [103] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, *Corrigendum: Anisotropic AC conductivity of strained graphene (2014 J. Phys.: Condens. Matter 26 125302)*, *Journal of Physics: Condensed Matter* **26**, 279501 (2014).
- [104] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, *Tunable dichroism and optical absorption of graphene by strain engineering*, *2D Materials* **2**, 025001 (2015).
- [105] H. Shioya, M. F. Craciun, S. Russo, M. Yamamoto, and S. Tarucha, *Straining Graphene Using Thin Film Shrinkage Methods*, *Nano Letters* **14**, 1158 (2014).
- [106] T. L. Linnik, *Effective Hamiltonian of strained graphene*, *Journal of Physics: Condensed Matter* **24**, 205302 (2012).
- [107] F. de Juan, J. L. Mañes, and M. A. H. Vozmediano, *Gauge fields from strain in graphene*, *Phys. Rev. B* **87**, 165131 (2013).
- [108] M. R. Masir, D. Moldovan, and F. Peeters, *Pseudo magnetic field in strained graphene: Revisited*, *Solid State Communications* **175–176**, 76 (2013).
- [109] A. Cortijo and M. Zubkov, *Emergent gravity in the cubic tight-binding model of Weyl semimetal in the presence of elastic deformations*, *Annals of Physics* **366**, 45 (2016).
- [110] C. D. Froggatt and H. B. Nielsen, *Origin of Symmetry* (World Scientific, Singapore, 1991).
- [111] G. E. Volovik, *The Universe in a Helium Droplet* (Clarendon Press, Oxford, 2003).
- [112] P. Hořava, *Stability of Fermi Surfaces and K Theory*, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 016405 (2005).
- [113] A. L. Kitt, V. M. Pereira, A. K. Swan, and B. B. Goldberg, *Erratum: Lattice-corrected strain-induced vector potentials in graphene [Phys. Rev. B 85, 115432 (2012)]*, *Phys. Rev. B* **87**, 159909(E) (2013).
- [114] A. L. Kitt, V. M. Pereira, A. K. Swan, and B. B. Goldberg, *Lattice-corrected strain-induced vector potentials in graphene*, *Phys. Rev. B* **85**, 115432 (2012).

- 
- [115] S. Zhu, J. A. Stroscio, and T. Li, *Programmable Extreme Pseudomagnetic Fields in Graphene by a Uniaxial Stretch*, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 245501 (2015).
- [116] F. Guinea, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, and K. S. Novoselov, *Generating quantizing pseudomagnetic fields by bending graphene ribbons*, *Phys. Rev. B* **81**, 035408 (2010).
- [117] D. L. Miller et al., *Observing the Quantization of Zero Mass Carriers in Graphene*, *Science* **324**, 924 (2009).
- [118] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics, Theory of Elasticity*, 3rd ed., Vol. 7 (Pergamon Press Oxford, 1986).
- [119] D. Nelson, S. Weinberg, and T. Piran, *Statistical mechanics of membranes and surfaces*, 2nd ed. (World Scientific Pub, 2004).
- [120] N.-C. Yeh et al., *Strain-induced pseudo-magnetic fields and charging effects on CVD-grown graphene*, *Surface Science* **605**, 1649 (2011).
- [121] J. Lu, A. C. Neto, and K. P. Loh, *Transforming moiré blisters into geometric graphene nano-bubbles*, *Nat Commun* **3**, 823 (2012).
- [122] N. N. Klimov et al., *Electromechanical Properties of Graphene Drumheads*, *Science* **336**, 1557 (2012).
- [123] D. Guo et al., *Observation of Landau levels in potassium-intercalated graphite under a zero magnetic field*, *Nat Commun* **3**, 1068 (2012).
- [124] L. Meng et al., *Strain-induced one-dimensional Landau level quantization in corrugated graphene*, *Phys. Rev. B* **87**, 205405 (2013).
- [125] S.-Y. Li et al., *Observation of unconventional splitting of Landau levels in strained graphene*, *Phys. Rev. B* **92**, 245302 (2015).
- [126] W. Yan et al., *Spatially resolving unconventional interface Landau quantization in a graphene monolayer-bilayer planar junction*, *Phys. Rev. B* **93**, 195408 (2016).

- 
- [127] M. C. Rechtsman et al., *Strain-induced pseudomagnetic field and photonic Landau levels in dielectric structures*, *Nat Photon* **7**, 153 (2013).
- [128] B. Tian, M. Endres, and D. Pekker, *Landau Levels in Strained Optical Lattices*, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 236803 (2015).
- [129] E. Mariani, A. J. Pearce, and F. von Oppen, *Fictitious gauge fields in bilayer graphene*, *Phys. Rev. B* **86**, 165448 (2012).
- [130] R. Roldán, A. Castellanos-Gomez, E. Cappelluti, and F. Guinea, *Strain engineering in semiconducting two-dimensional crystals*, *Journal of Physics: Condensed Matter* **27**, 313201 (2015).
- [131] A. J. Pearce and G. Burkard, *A Tight Binding Approach to Strain and Curvature in Monolayer Transition-Metal Dichalcogenides*, [arXiv:1511.06254](https://arxiv.org/abs/1511.06254) .
- [132] D. Midtvedt, C. H. Lewenkopf, and A. Croy, *Strain–displacement relations for strain engineering in single-layer 2d materials*, *2D Materials* **3**, 011005 (2016).
- [133] E. Tang and L. Fu, *Strain-induced partially flat band, helical snake states and interface superconductivity in topological crystalline insulators*, *Nat Phys* **10**, 964 (2014).
- [134] A. Cortijo, Y. Ferreirós, K. Landsteiner, and M. A. H. Vozmediano, *Elastic Gauge Fields in Weyl Semimetals*, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 177202 (2015).
- [135] V. Atanasov and A. Saxena, *Tuning the electronic properties of corrugated graphene: Confinement, curvature, and band-gap opening*, *Phys. Rev. B* **81**, 205409 (2010).
- [136] V. Adamyan and V. Zavalniuk, *Phonons in graphene with point defects*, *Journal of Physics: Condensed Matter* **23**, 015402 (2011).
- [137] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, *Sound waves induce Volkov-like states, band structure and collimation effect in graphene*, *Journal of Physics: Condensed Matter* **28**, 025301 (2016).



- 
- [138] F. Zhai, X. Zhao, K. Chang, and H. Q. Xu, *Magnetic barrier on strained graphene: A possible valley filter*, *Phys. Rev. B* **82**, 115442 (2010).
- [139] Y. Jiang, T. Low, K. Chang, M. I. Katsnelson, and F. Guinea, *Generation of Pure Bulk Valley Current in Graphene*, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 046601 (2013).
- [140] M. Grifoni and P. Hänggi, *Driven quantum tunneling*, *Physics Reports* **304**, 229 (1998).
- [141] D. Wolkow, *Über eine Klasse von Lösungen der Diracschen Gleichung*, *Zeitschrift für Physik* **94**, 250 (1935).
- [142] C. Cronström and M. Noga, *Photon induced relativistic band structure in dielectrics*, *Physics Letters A* **60**, 137 (1977).
- [143] W. Becker, *Relativistic charged particles in the field of an electromagnetic plane wave in a medium*, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **87**, 601 (1977).
- [144] V. B. Berestetskii, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii, *Quantum Electrodynamics*, 2nd ed., Vol. 4 (Mir, Moscow, 1982).
- [145] D. G. Vladislav G. Bagrov, *The Dirac Equation and Its Solutions* (Walter de Gruyter, Berlin, 2015).
- [146] S. Varró, *New exact solutions of the Dirac equation of a charged particle interacting with an electromagnetic plane wave in a medium*, *Laser Physics Letters* **10**, 095301 (2013).
- [147] S. Varró, *A new class of exact solutions of the Klein–Gordon equation of a charged particle interacting with an electromagnetic plane wave in a medium*, *Laser Physics Letters* **11**, 016001 (2014).
- [148] 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).

- 
- [149] N. McLachlan, *Theory and Application of Mathieu Functions*, 1st ed. (Clarendon, New York, 1951).
- [150] L. Brillouin, *Wave Propagation in Periodic Structures*, 2nd ed. (Dover Publications, Inc., New York, 1953).
- [151] A. Vaezi, N. Abedpour, R. Asgari, A. Cortijo, and M. A. H. Vozmediano, *Topological electric current from time-dependent elastic deformations in graphene*, *Phys. Rev. B* **88**, 125406 (2013).
- [152] K. Sasaki, H. Gotoh, and Y. Tokura, *Valley-antisymmetric potential in graphene under dynamical deformation*, *Phys. Rev. B* **90**, 205402 (2014).
- [153] J. Bergou and S. Varró, *Nonlinear scattering processes in the presence of a quantised radiation field. II. Relativistic treatment*, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **14**, 2281 (1981).