Transformación de una red hexagonal a una red de ladrillo

Observemos la Figura 1 en la que exponemos la geometría de la red hexagonal de grafeno junto con sus vectores primitivos a_1 y a_2 y los vectores a primeros vecinos δ_1, δ_2 y δ_3 los cuales explicitamente están dados por:

$$\delta_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3})$$
$$\delta_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3})$$
$$\delta_3 = -a(1, 0)$$
$$a_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3})$$
$$a_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3})$$

Pretendemos deformar esta red de tal modo que obtengamos una red de ladrillo lo cual es topológicamente equivalente a la hexagonal. Para ello proponemos la siguiente transformación:

$$\delta_3{}' = (-cos\theta, sen\theta)$$

Que para cuando $\theta = 0$ obtenemos el vector δ_3 original. Hemos propuesto esta transformación pensando en que el vector δ_3 puede moverse libremente dentro de una circunferencia y si esto es así, toda la red también se modificará, de modo que los vectores δ_2 y δ_1 sufrirán también una transformación. Para encontrarla, situémonos en el átomo A que es la posición $(0, 0)$ (ver Figura 1) de modo que, para llegar a la posición de los primeros vecinos de A situados en las posiciones r_1 y r_2 respectivamente debemos hacer:

$$r_1 = a_1 + \delta_3 = (\frac{3}{2} - cos\theta, \frac{\sqrt{3}}{2} + sen\theta)$$
$$r_2 = a_2 + \delta_3 = (\frac{3}{2} - cos\theta, -\frac{\sqrt{3}}{2} + sen\theta)$$

Por lo tanto, los vectores que traen consigo la deformación de la red son:

$$\delta_1{}' = (\frac{3}{2} - cos\theta, \frac{\sqrt{3}}{2} + sen\theta)$$

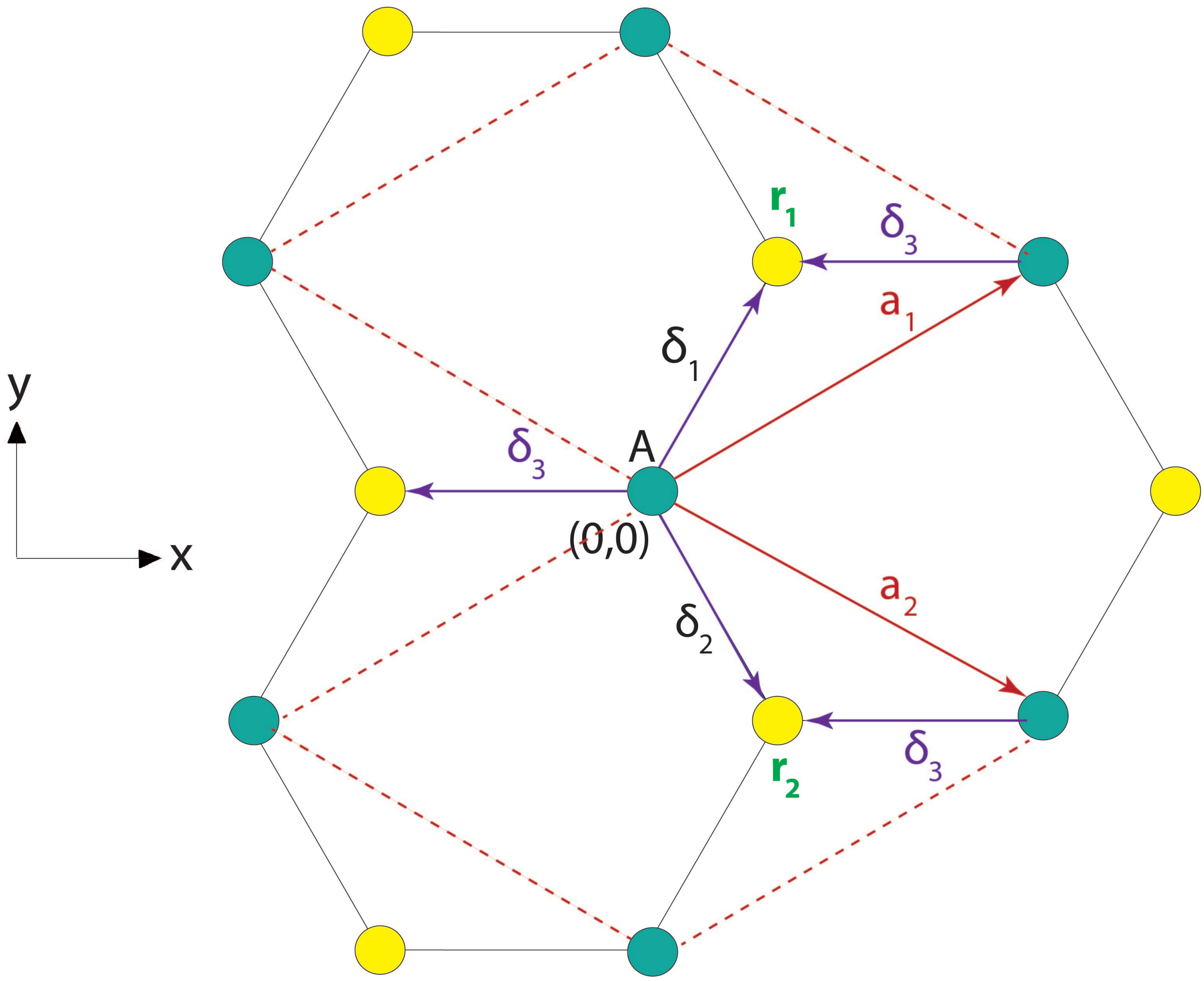

FIG. 1: La red hexagonal con sus vectores primitivos.

$$\delta_2{}' = (\frac{3}{2} - cos\theta, -\frac{\sqrt{3}}{2} + sen\theta)$$
$$\delta_3{}' = (-cos\theta, sen\theta)$$

O, en términos de los vectores a_1 y a_2

$$\delta_1{}' = a_1 + \delta_3 \tag{1}$$

$$\delta_2{}' = a_2 + \delta_3 \tag{2}$$

Observando la figura, vemos que para aproximarse a la red de ladrillo, que es nuestro objetivo, podemos proyectar el vector δ_3 a lo largo de la dirección a_2 así obetendríamos una red próxima a ser cuadrada. El ángulo que debe rotar δ_3 es $\frac{\pi}{6}$ es fácil verlo ya que,

$$a_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3})$$

, entonces,

$$tan\alpha = \frac{-\frac{sqrt3}{2}}{\frac{3}{2}} = -\frac{1}{\sqrt{3}}$$

Esto es,

$$\alpha = \frac{\pi}{6}$$

Haciendo un programa en Matlab encontramos que la transformación con $\alpha = \frac{\pi}{6}$ da la siguiente red rectangular:

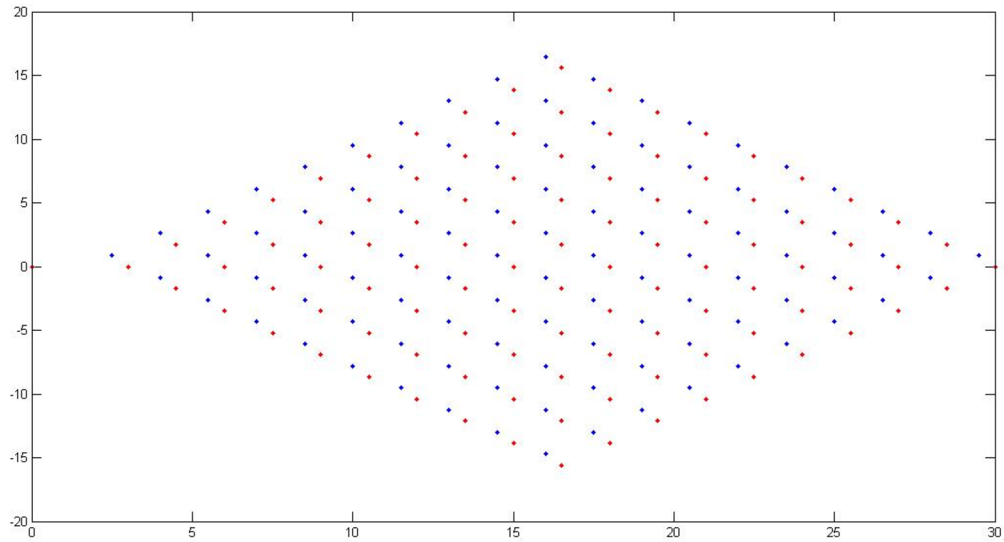

FIG. 2: La red hexagonal con una rotación de $\frac{\pi}{6}$.

Ahora, si recordamos que para calcular la relación de dispersión debemos resolver el siguiente determinante,

$$\begin{vmatrix} -E & 1 + e^{ik\cdot(-\delta_1+\delta_2)} + e^{ik\cdot(-\delta_1+\delta_3)} \\ 1 + e^{-ik\cdot(-\delta_1+\delta_2)} + e^{-ik\cdot(-\delta_1+\delta_3)} & -E \end{vmatrix} = 0 \tag{3}$$

Y sustituyendo los valores dados en las ecuaciones (1) y (2), el determinante dado por (3) puede reducirse a la siguiente forma más general:

$$\begin{vmatrix} -E & 1+e^{ik\cdot(-a_1+a_2)}+e^{ik\cdot(-a_1)} \\ 1+e^{-ik\cdot(-a_1+a_2)}+e^{-ik\cdot(-a_1)} & -E \end{vmatrix} = 0 \tag{4}$$

Y la relación de dispersión queda en términos de los vectores a_1 y a_2:

$$E^2 = 3 + 2cos\left[k\cdot(a_2-a_1)\right] + 2cos\left[k\cdot a_1\right] + 2cos\left[k\cdot a_2\right] \tag{5}$$

Así que, para cualquier red, bastará conocer los vectores primitivos a_1, a_2 y el vector δ_3 para calcular la relación de dispersión.

De modo que, una relación así de general podría ser utilizada para encontrar los eigenvalores de los operadores $\hat{P}_x$ y $\hat{P}_y$. Una vez más, situémonos en la posición (0,0) en la Figura 3

$$\hat{P}_x = \frac{im}{\hbar}\begin{pmatrix} 0 & \delta_3^x+\delta_1^x e^{ik\cdot a_1}+\delta_2^x e^{ik\cdot a_2} \\ \delta_3^x+\delta_1^x e^{ik\cdot a_1}+\delta_2^x e^{ik\cdot a_2} & 0 \end{pmatrix} \tag{6}$$

$$\hat{P}_y = \frac{im}{\hbar}\begin{pmatrix} 0 & \delta_3^y+\delta_1^y e^{ik\cdot a_1}+\delta_2^y e^{ik\cdot a_2} \\ \delta_3^y+\delta_1^y e^{ik\cdot a_1}+\delta_2^y e^{ik\cdot a_2} & 0 \end{pmatrix} \tag{7}$$

Y al resolver la ecuación de valores propios, encontramos los eigenvalores para $\hat{P}_x$ y $\hat{P}_y$ respectivamente:

$$p_x = [(\delta_3^x)^2+(\delta_2^x)^2+(\delta_1^x)^2+\delta_3^x\delta_2^x e^{-ik\cdot a_2}+\delta_3^x\delta_1^x e^{-ik\cdot a_1}+\delta_3^x\delta_2^x e^{ik\cdot a_2}+\delta_2^x\delta_1^x e^{ik\cdot a_2}e^{-ik\cdot a_1}+\delta_3^x\delta_1^x e^{ik\cdot a_1}+\delta_2^x\delta_1^x e^{ik\cdot a_1}e^{-ik\cdot a} \tag{8}$$

$$p_y = [(\delta_3^y)^2+(\delta_2^y)^2+(\delta_1^y)^2+\delta_3^y\delta_2^y e^{-ik\cdot a_2}+\delta_3^y\delta_1^y e^{-ik\cdot a_1}+\delta_3^y\delta_2^y e^{ik\cdot a_2}+\delta_2^y\delta_1^y e^{ik\cdot a_2}e^{-ik\cdot a_1}+\delta_3^y\delta_1^y e^{ik\cdot a_1}+\delta_2^y\delta_1^y e^{ik\cdot a_1}e^{-ik\cdot a_2} \tag{9}$$