

Interacción espín-órbita en el grafeno

AUTOR

Joseph P.Vera

Lima, Perú

2021

Resumen

En el presente trabajo se analiza la influencia del acoplamiento espín-órbita sobre la estructura electrónica para el caso del grafeno. El estudio de tal influencia se realizó dentro del marco de la teoría DFT (Density Functional Theory). Dicho estudio inicialmente fue realizado mediante la simulación de la estructura cristalina y luego mediante la estructura electrónica.

Para ello ha sido necesario la utilización de un software especializado como el exciting code.

Agradecimientos

The acknowledgements and the people to thank go here, don't forget to include your project advisor...

Índice general

Índice general	III
Índice de figuras	V
Índice de cuadros	VI
Abreviaciones	VII
1. Introducción	1
2. Fundamento Teórico	3
2.1. Carbono y sus hibridaciones	3
2.1.1. Hibridación sp^2 en el átomo de carbono	4
2.2. Estructura cristalina	5
2.2.1. Vectores primitivos del espacio real y recíproco	6
2.3. Modelo Tight Binding	8
2.3.1. Relación de dispersión	10
2.4. Interacción espín-órbita	11
2.4.1. Interacción espín-órbita en el átomo de Hidrógeno	11
2.4.2. Interacción espín-órbita en el Carbono	19
2.4.3. Interacción espín-órbita en el grafeno	21
3. Resultados	25
3.1. Estructura electrónica	25
3.2. Densidad de estados (DOS)	27
3.2.1. Subsection 2	28
3.3. Main Section 2	28
4. Conclusiones	29
4.1. Main Section 1	29
4.1.1. Subsection 1	29
4.1.2. Subsection 2	29
4.2. Main Section 2	29
A. Celda unitaria del grafeno	30

B. Simulación de la estructura de bandas y DOS	32
---	-----------

Bibliografía	35
---------------------	-----------

Índice de figuras

2.1. Hibridaciones sp , sp^2 y sp^3 [Foa20].	4
2.2. Estructuras formadas por las hibridaciones en el carbono. (a) Diamante (sp^3), (b) Grafito (sp^2) y (c) Cadena de polyynes y cumuleno (sp) [Foa20].	4
2.3. Salto del electrón. (a) Estado fundamental y (b) Estado excitado.	4
2.4. Hibridación sp^2	5
2.5. (a) Estructura cristalina del grafeno y (b) los orbitales de la hibridación sp^2	5
2.6. Red del espacio real donde (a) Superposición de redes A y B [Vij17] y (b) Base con átomos A y B, y vectores primitivos \vec{a}_1 y \vec{a}_2 [Foa20].	6
2.7. Vecinos más próximos [Cas09].	7
2.8. Red del espacio recíproco, donde el hexágono sombreado se refiere a la primera zona de Brillouin [Foa20].	7
2.9. Estructura de banda del grafeno y conos de Dirac [Van16].	10
2.10. Electrón moviéndose alrededor del núcleo.	11
2.11. Núcleo moviéndose alrededor del electrón.	12
2.12. Momento magnético y momento angular en un dipolo magnético.	13
2.13. Dipolo magnético.	14
2.14. (a) Marcos de referencia usados para calcular la precesión de Thomas y (b) marcos de referencia vistos desde el marco de referencia x_1 y y_1	15
2.15. Configuración $2p^2$ [Cru86].	21
3.1. Simulación de la estructura electrónica del grafeno con SOC.	25
3.2. Simulación de la estructura electrónica con SOC en diferente dirección.	26
3.3. Estructura electrónica con SOC, donde se muestra los gaps en las bandas de los enlaces σ y π [Yao07].	27
3.4. DOS del grafeno.	27
A.1. (a) Celda unitaria con base de dos átomos [Dav18] y (b) Simulación de la celda unitaria hecho en Exciting Code.	30
A.2. Celda unitaria tridimensional.	31

Índice de cuadros

2.1. Clasificación de los microestados $2p^2$	20
---	----

Abreviaciones

SOC	S pin O rbit C oupling
DOS	D ensity O f S tates
1ZB	P rimera Z ona de B rillouin

Dedicado a mis padres y tíos por su apoyo incondicional

Capítulo 1

Introducción

El grafeno es un material bidimensional el cual consiste en una sola capa (monocapa), en donde los átomos de carbono que lo componen están dispuestos en un arreglo hexagonal [Goe11]. La estructura hexagonal del material es debido a la formación de orbitales híbridos ya que forman fuertes enlaces covalentes, esta hibridización es del tipo sp^2 [Cas09]. Por ende estos son los responsables de la formación de los enlaces sigma (σ).

De las muchas propiedades que el material presenta la más interesante es el caso de las propiedades electrónicas, esto debido a que dicha propiedad se ve influenciada únicamente por orbitales del tipo p_z (cabe mencionar que este es un orbital sin hibridar), los cuales forman los enlaces pi (π). Con ello es posible la obtención de la estructura de bandas del grafeno, del cual podremos observar la existencia de ciertos puntos de alta simetría. Son estos puntos los conocidos puntos de Dirac y son el lugar en donde los electrones se comportan como fermiones de Dirac sin masa [Cas09].

Por otra parte es importante tener en cuenta la presencia de la interacción espín-órbita [Kon10]. Este es un fenómeno de acoplamiento que sucede debido a la interacción entre el espín del electrón y el campo magnético interno del átomo. Este fenómeno se expresa como el desdoblamiento de las líneas espectrales del átomo.

En el caso del grafeno el acoplamiento espín-órbita (SOC) es extremadamente débil con lo cual realizar la observación experimental es muy dificultoso y desafiante [Kur19]. Aunque existen datos experimentales de este fenómeno en el caso puro del grafeno, diferentes estudios han logrado demostrar que mediante la hidrogenación del material se logra mejorar dicha interacción [Gmi13]. Sin embargo, esto trae como consecuencia la obtención de interacción espín-órbita (SOC), pero del tipo Rashba [Che12, Li17].

Este material desde su descubrimiento hasta la actualidad sigue siendo muy prometedor para futuras aplicaciones debido a sus extraordinarias propiedades. Es por ello que esta

investigación será de gran aporte para el campo de la espintrónica y además la aparición del efecto espín Hall Cuántico [Kan05, Kan07, Nov07], lo cual es muy importante ya que podría llevarnos a observar fases topológicas en el grafeno y por ello a una mejor comprensión de los aislantes topológicos.

El objetivo del presente trabajo es analizar la influencia de la interacción espín-órbita sobre las propiedades electrónicas del grafeno. Basandonos en el estudio de la estructura de bandas.

En el capítulo 2 se revisa algunos conceptos básicos, tales como la hibridación sp^2 , el modelo tight binding y la interacción espín-órbita. En el capítulo 3 se presenta(Falta: aquí se desarrollara una breve descripción de los capítulos)

Capítulo 2

Fundamento Teórico

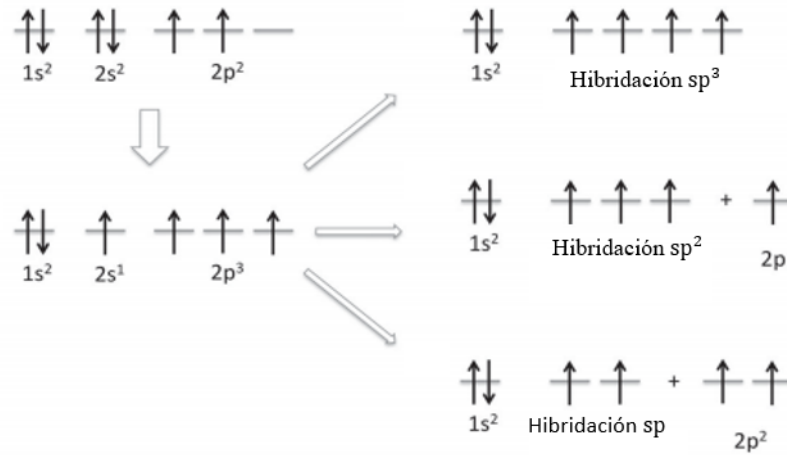
En este capítulo se discute brevemente los conceptos básicos sobre el grafeno, además del desarrollo del modelo tight binding para describir la estructura electrónica y la relación lineal entre el momento y la energía, así como también la interacción espín orbita.

2.1. Carbono y sus hibridaciones

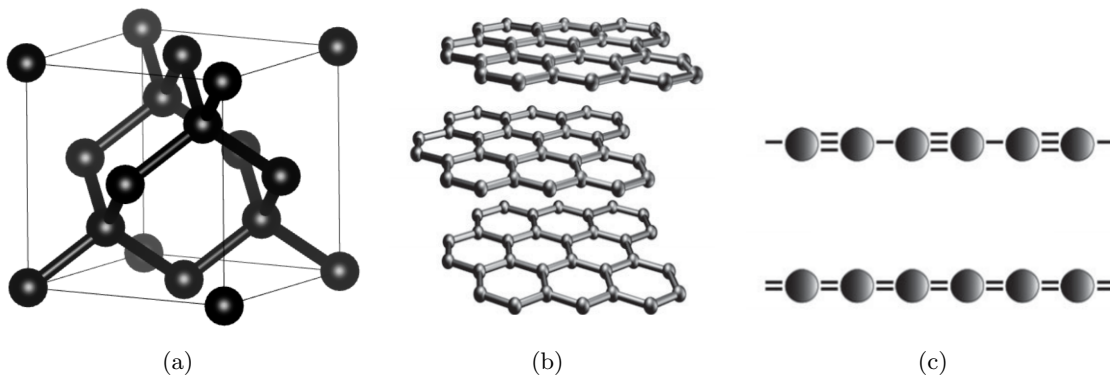
El átomo de carbono es un elemento que debido a su capacidad de formar enlaces simples, dobles y triples puede unirse (formar enlaces) con diferentes tipos de átomos con lo cual formar una gran variedad de estructuras. Pero lo más interesante es que puede formar, junto a otros átomos de carbono, estructuras mediante la hibridación de los orbitales. Hibridaciones tales como las del tipo sp, sp^2, sp^3 (ver figura 2.1).

En el caso de la hibridación sp se forma un enlace triple (muy fuerte) debido a la unión de un orbital atómico s con un orbital p_x , lo cual a su vez permite formar dos orbitales híbridos sp . Este tipo de enlace forma estructuras lineales (cadenas de átomos de carbono) (ver figura 2.2.c).

Mientras que la hibridación sp^3 forma enlaces simples debido a la unión de un orbital s con tres orbitales p (p_x , p_y y p_z). Este tipo de enlace forma estructuras complejas como por ejemplo la del diamante (ver figura 2.2.a).


 FIGURA 2.1: Hibridaciones sp , sp^2 y sp^3 [Foa20].

La hibridación sp^2 forma estructuras tales como la del grafito y la del grafeno. Los detalles se explican a continuación.


 FIGURA 2.2: Estructuras formadas por las hibridaciones en el carbono. (a) Diamante (sp^3), (b) Grafito (sp^2) y (c) Cadena de polyne y cumuleno (sp) [Foa20].

2.1.1. Hibridación sp^2 en el átomo de carbono

Un electrón de orbital $2s$ pasará al orbital $2p$ vacío, como se puede observar en la figura 2.3:

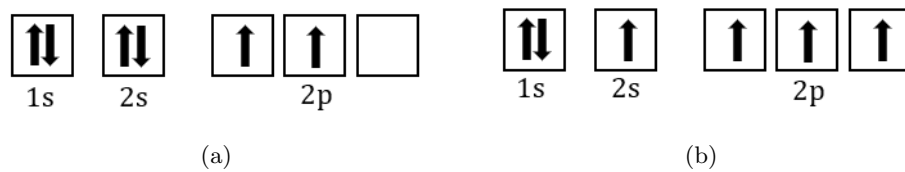


FIGURA 2.3: Salto del electrón. (a) Estado fundamental y (b) Estado excitado.

Cuando los átomos de carbono forman la estructura hexagonal, necesitan tener un orbital p sin hibridar, como se observa en la figura 2.4.

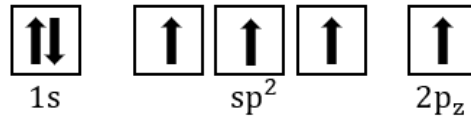


FIGURA 2.4: Hibridación sp^2 .

2.2. Estructura cristalina

El grafeno es un material compuesto únicamente por átomos de carbono, los cuales se encuentran dispuestos en una red hexagonal (ver figura 2.5).

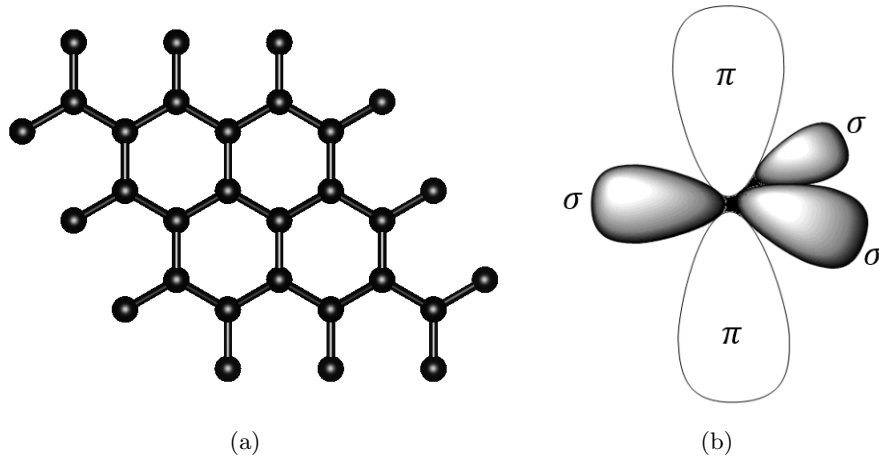


FIGURA 2.5: (a) Estructura cristalina del grafeno y (b) los orbitales de la hibridación sp^2 .

Los átomos de carbono tienen una configuración electrónica $1s^2 2s^2 2p^2$, en donde su capa más externa posee 4 electrones (electrones de valencia). A partir de ello podríamos esperar que estos átomos formen solo 2 enlaces covalentes (ver el estado fundamental del carbono en la figura 2.1), pero esto no es así.

A partir de la experimentación se sabe que realmente el átomo de carbono cuando interactúa con otros átomos forma 4 enlaces covalentes, esto se debe a que se forma un tipo de orbital especial por medio de la hibridación de orbitales. En este caso se da la hibridación del tipo sp^2 , como se ve en la figura 2.5.b [Goe11].

2.2.1. Vectores primitivos del espacio real y recíproco

Debido a que encontramos en la red hexagonal átomos (A y B) no equivalentes, consideramos la red como una superposición de dos subredes triangulares como se observa en la figura 2.6.

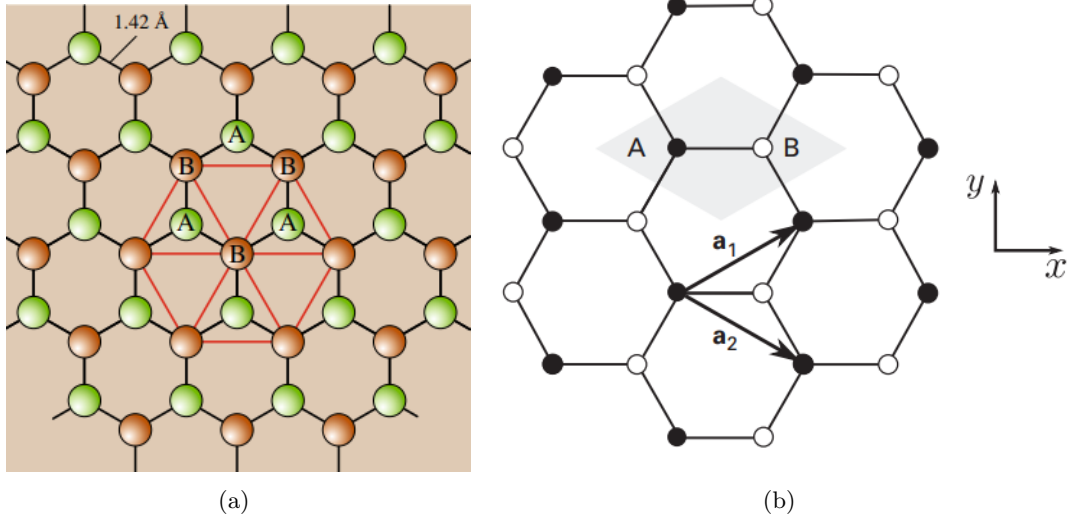


FIGURA 2.6: Red del espacio real donde (a) Superposición de redes A y B [Vij17] y (b) Base con átomos A y B, y vectores primitivos \vec{a}_1 y \vec{a}_2 [Foa20].

Los vectores primitivos están dados por:

$$\vec{a}_1 = a\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right) \quad , \quad \vec{a}_2 = a\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right) \quad (2.1)$$

Donde $a = \sqrt{3}a_{cc}$ y $a_{cc} = 1,42\text{\AA}$.

Los tres vecinos más próximos están dados por (ver figura 2.7):

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

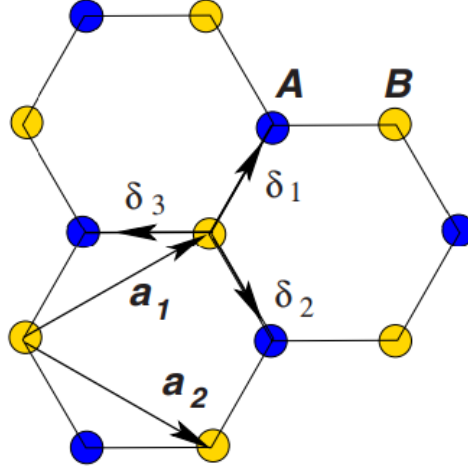


FIGURA 2.7: Vecinos más próximos [Cas09].

Para el caso de la red recíproca, tendremos que los vectores primitivos serán:

$$\vec{b}_1 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right) , \quad \vec{b}_2 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad (2.3)$$

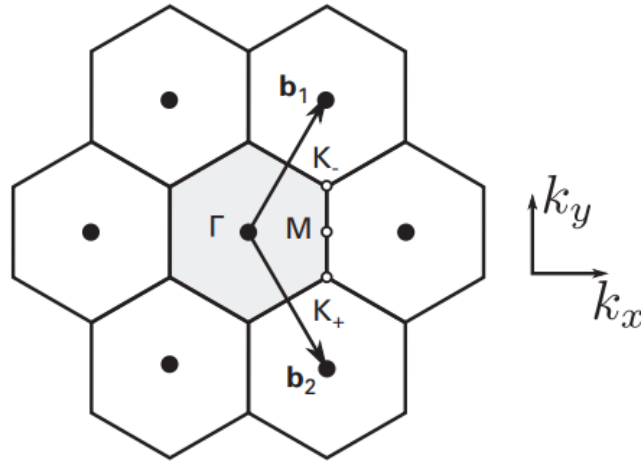


FIGURA 2.8: Red del espacio recíproco, donde el hexágono sombreado se refiere a la primera zona de Brillouin [Foa20].

A partir de la primera zona de Brillouin (1ZB) (ver figura 2.5) podremos obtener puntos de alta simetría (K_- , K_+ , M) [Per10], los cuales serán muy útiles para poder simular la estructura electrónica.

$$M = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} (1, 0) , \quad K_+ = \frac{4\pi}{3a} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right), \quad K_- = \frac{4\pi}{3a} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right) \quad (2.4)$$

2.3. Modelo Tight Binding

En la aproximación de la banda π , es importante tener en cuenta que el átomo A o B son definidos solo por un orbital por átomo ya que solo los orbitales p_z (encargados de formar los enlaces π) contribuyen a las propiedades electrónicas.

$$\varphi(r - r_A) \quad , \quad \varphi(r - r_B) \quad (2.5)$$

Las eigenfunciones es una combinación lineal de las sumas de Bloch de cada red

$$\psi(k, r) = c_A(k)\phi^A(k, r) + c_B(k)\phi^B(k, r) \quad (2.6)$$

Entonces para los orbitales π

$$\varphi^A(k, r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_j} e^{iK \cdot R_j} \varphi(r - r_A - R_j) \quad (2.7)$$

$$\varphi^B(k, r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_j} e^{iK \cdot R_j} \varphi(r - r_B - R_j) \quad (2.8)$$

Si usamos la ecuación de Schrodinger para solucionar el problema del eigenvalor:

$$H\psi(k, r) = E\psi(k, r) \quad (2.9)$$

Expresandolo en terminos matriciales

$$H(k) \begin{pmatrix} c_A(k) \\ c_B(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{AA}(k) & H_{AB}(k) \\ H_{BA}(k) & H_{BB}(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_A(k) \\ c_B(k) \end{pmatrix} = E(k) \begin{pmatrix} S_{AA}(k) & S_{AB}(k) \\ S_{BA}(k) & S_{BB}(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_A(k) \\ c_B(k) \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

$$S_{\alpha\beta}(k) = \langle \phi^\alpha(k) | \phi^\beta(k) \rangle \quad (2.11)$$

Si ignoramos la superposición de orbitales p_z vecinos, obtendremos:

$$S_{\alpha\beta}(k) = \delta_{\alpha\beta} \quad (2.12)$$

y los elementos de matriz del hamiltonianos se expresan de la siguiente manera

$$H_{AA}(k) = \frac{1}{N} \sum_{R_i, R_j} e^{ik \cdot (R_j - R_i)} \langle \varphi^{A, R_i} | H | \varphi^{A, R_j} \rangle \quad (2.13)$$

$$H_{BB}(k) = \frac{1}{N} \sum_{R_i, R_j} e^{ik \cdot (R_j - R_i)} \langle \varphi^{B, R_i} | H | \varphi^{B, R_j} \rangle \quad (2.14)$$

con $H_{AA} = H_{BB}$ y $H_{AB} = H_{BA}^*$.

Considerando la ecuación (2.10), la ecuación (2.9) se reduce a la siguiente expresión

$$\begin{pmatrix} H_{AA}(k) & H_{AB}(k) \\ H_{BA}(k) & H_{BB}(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_A(k) \\ c_B(k) \end{pmatrix} = E(k) \begin{pmatrix} c_A(k) \\ c_B(k) \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

Restringimos la interacción a los primeros vecinos

$$H_{AB}(k) = \langle \varphi^{A,0} | H | \varphi^{B,0} \rangle + e^{-ik \cdot a_1} \langle \varphi^{A,0} | H | \varphi^{B,-a_1} \rangle + e^{-ik \cdot a_2} \langle \varphi^{A,0} | H | \varphi^{B,-a_2} \rangle \quad (2.16)$$

$$H_{AB}(k) = \gamma_0 \alpha(k) \quad (2.17)$$

Donde γ_0 es una integral de transferencia y $\alpha(k)$ queda definida como

$$\alpha(k) = 1 + e^{-ik \cdot a_1} + e^{-ik \cdot a_2} \quad (2.18)$$

Si elegimos una energía de referencia, de tal manera que $H_{AA} = H_{BB} = 0$. Nos permite escribir el hamiltoniano como

$$H = \begin{pmatrix} 0 & -\gamma_0 \alpha(k) \\ -\gamma_0 \alpha(k)^* & 0 \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

Ahora lo que nos queda es encontrar el eigenvalor (la energía), esto es posible diagonalizando el hamiltoniano de la ecuación (2.19)

$$|H(k) - EI| = 0 \quad (2.20)$$

$$E^\pm(k) = \pm \gamma_0 |\alpha(k)| \quad (2.21)$$

$$E^\pm(k) = \pm \gamma_0 \sqrt{3 + 2\cos(k \cdot a_1) + 2\cos(k \cdot a_2) + 2\cos(k \cdot (a_2 - a_1))} \quad (2.22)$$

$$E^\pm(k) = \pm \gamma_0 \sqrt{1 + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right)\cos\left(\frac{k_y a}{2}\right)\cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right)} \quad (2.23)$$

Para poder simular la estructura electrónica debemos tener en cuenta que los vectores de onda $K = (k_x, k_y)$ deben ser elegidos dentro de la 1ZB [Per10]. Y si tenemos en cuenta los puntos de alta simetría mencionados anteriormente (K_+, K_-)

$$\alpha(k = K_+) = \alpha(k = K_-) = 0 \quad (2.24)$$

veremos que los cruces de la banda de valencia y la banda de conducción se dan en dichos puntos, los cuales es posible distinguir en la figura 2.9.

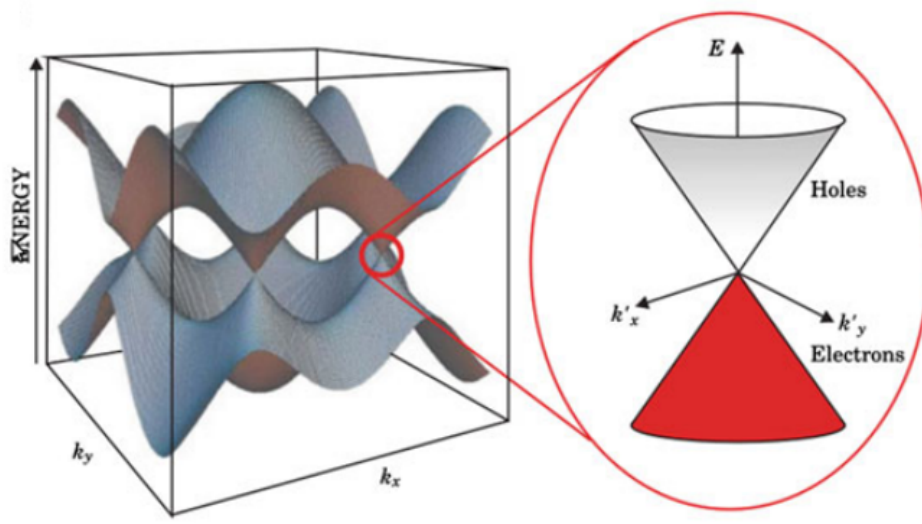


FIGURA 2.9: Estructura de banda del grafeno y conos de Dirac [Van16].

La banda de valencia (-) esta relacionada al antienlace π^* , mientras que la banda de conducción (+) al enlace π .

2.3.1. Relación de dispersión

Si expandimos la ecuación (2.22) en la vecindad de los puntos de alta simetría K_+ y K_-

$$k \rightarrow K_+ + k \quad (2.25)$$

$$k \rightarrow K_- + k \quad (2.26)$$

Observaremos que se producira una dispersión lineal en las bandas π y π^* cerca de los vértices de la 1ZB hexagonal.

$$E_{\pm} = \pm \hbar v_F |k| \quad (2.27)$$

Donde $v_F = \frac{\sqrt{3}\gamma_0 a}{2\hbar}$ es la velocidad del grupo.

Lo más interesante sucede en la vecindad de los vértices de la 1ZB, ya que es allí donde los electrones imitan el comportamiento de los fermiones de Dirac sin masa y además se forman los conos de Dirac (ver figura 2.9) [Cas09, Goe11, Per10]. Este comportamiento que asumen los electrones influencia directamente sobre las propiedades electrónicas del grafeno.

2.4. Interacción espín-órbita

Cuando se observa el espectro de las líneas de emisión con espectrómetros de alta resolución, encontramos que cada línea no es simple sino que está compuesta por varias líneas adicionales bastante próximas, esto significa que existen interacciones secundarias que se agregan a la interacción principal (electrón-núcleo).

2.4.1. Interacción espín-órbita en el átomo de Hidrógeno

Para este caso, el fenómeno se debe al acoplamiento magnético asociado al espín del electrón y el campo magnético interno del átomo. El campo magnético interno incluye el campo generado por el movimiento orbital de los electrones.

Podemos partir del uso de la teoría de Bohr y la relatividad, ya que los resultados obtenidos se logran justificar por la teoría de Dirac. Teniendo en cuenta que el electrón de carga $-e$ se mueve alrededor del núcleo $+Ze$ describiendo una órbita de Bohr (ver figura 2.10).

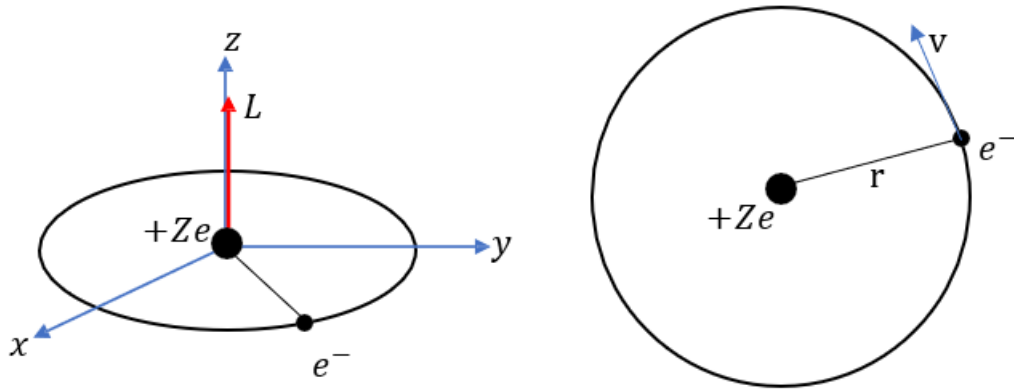


FIGURA 2.10: Electrón moviéndose alrededor del núcleo.

Pero se considerara el núcleo describiendo una órbita de Bohr alrededor del electrón con una velocidad $-v$ (ver figura 2.11).

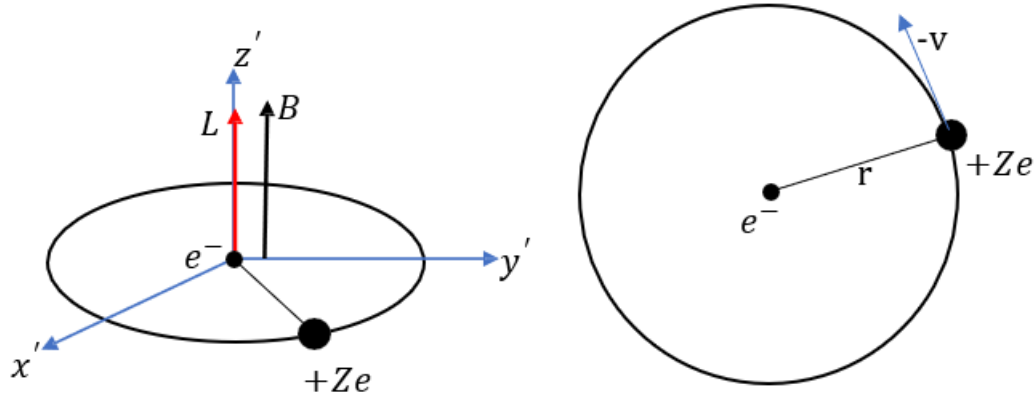


FIGURA 2.11: Núcleo moviéndose alrededor del electrón.

Dicho núcleo genera una densidad de corriente

$$\vec{j} = -Ze\vec{v} \quad (2.28)$$

El campo magnético en la posición del electrón producido por el movimiento nuclear, de acuerdo a la ley de Biot-Savart, es

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\vec{j} \times \vec{r}}{r^3} = -\frac{Ze\mu_0}{4\pi} \frac{\vec{v} \times \vec{r}}{r^3} \quad (2.29)$$

Y el campo eléctrico generado por la carga nuclear en la posición del electrón fijo

$$\vec{E} = k \frac{Ze}{r^3} \hat{r} \quad (2.30)$$

Si combinamos las ecuaciones (2.29) y (2.30)

$$\vec{B} = \frac{1}{c^2} \vec{v} \times \vec{E} \quad (2.31)$$

Considerando que un electrón se mueve en una órbita circular de Bohr. La carga produce una corriente

$$i = \frac{e}{c} \frac{1}{\tau} = \frac{e}{c} \frac{v}{2\pi r} \quad (2.32)$$

La corriente produce un campo magnético que, a grandes distancias, es igual al producido por un dipolo magnético ubicado en el centro de la órbita. Por tanto el momento magnético

$$\mu = iA = \frac{e}{c} \frac{v}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{evr}{2c} \quad (2.33)$$

Como la órbita es circular r y v son perpendiculares

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = m\vec{r}\vec{v} \quad (2.34)$$

Relación entre el momento magnético y momento angular (ver figura 2.12)

$$\frac{\mu_l}{L} = \frac{e}{2mc} \quad (2.35)$$

Como $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$, entonces

$$\frac{\mu_l}{L} = g \frac{\mu_B}{\hbar} \quad (2.36)$$

De forma vectorial

$$\vec{\mu}_l = g_l \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} \quad (2.37)$$

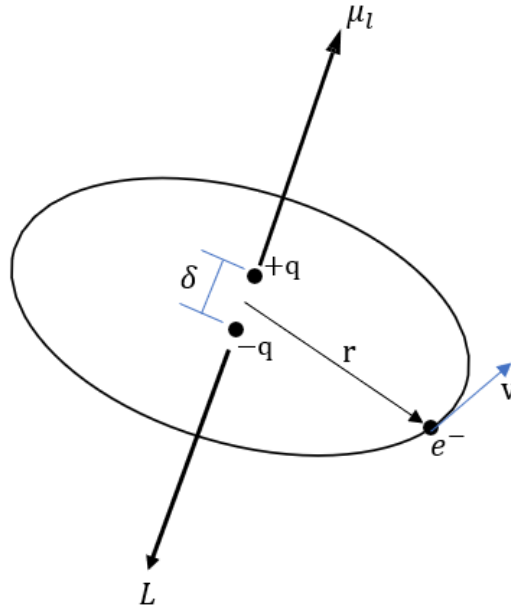


FIGURA 2.12: Momento magnético y momento angular en un dipolo magnético.

Cuando un sistema cuyo momento magnético $\vec{\mu}_l$ se encuentra en un campo magnético externo \vec{B} este tendrá una energía potencial

$$F = -\nabla E \longrightarrow F = -\frac{\partial E}{\partial r} \quad (2.38)$$

$$E = -rF \quad (2.39)$$

Entonces en el dipolo magnético, como se observa en la figura 2.13

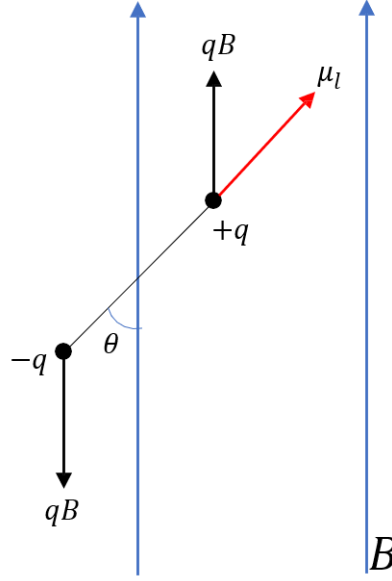


FIGURA 2.13: Dipolo magnético.

$$E = -(Z)qB - (-Z)qB = -2\frac{\delta \cos\theta}{2}qB = \mu B \cos\theta \quad (2.40)$$

$$E = -\vec{\mu}_l \cdot \vec{B} \quad (2.41)$$

Análogamente a las ecuaciones (2.37) y (2.41) tendremos

$$\vec{\mu}_s = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S} \quad (2.42)$$

$$E_{SL}^{(1)} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} \quad (2.43)$$

Reemplazando la ecuación (2.42) en la (2.43)

$$E_{SL}^{(1)} = \frac{g_s \mu_B}{\hbar} \vec{S} \cdot \vec{B} \quad (2.44)$$

Esto se ha encontrado en el marco de referencia donde el electrón se encuentra en reposo. Pero lo que realmente nos interesa es conocer en el marco de referencia donde el núcleo se encuentra en reposo.

Entonces para ello tendremos en cuenta las transformaciones relativistas, consideraremos un observador en el marco de referencia xy donde el núcleo se encuentra en reposo (ver figura 2.14.a).

Para ello debemos hacer uso de los marcos de referencia (ver figura 2.14.b) y las transformaciones de Lorentz.

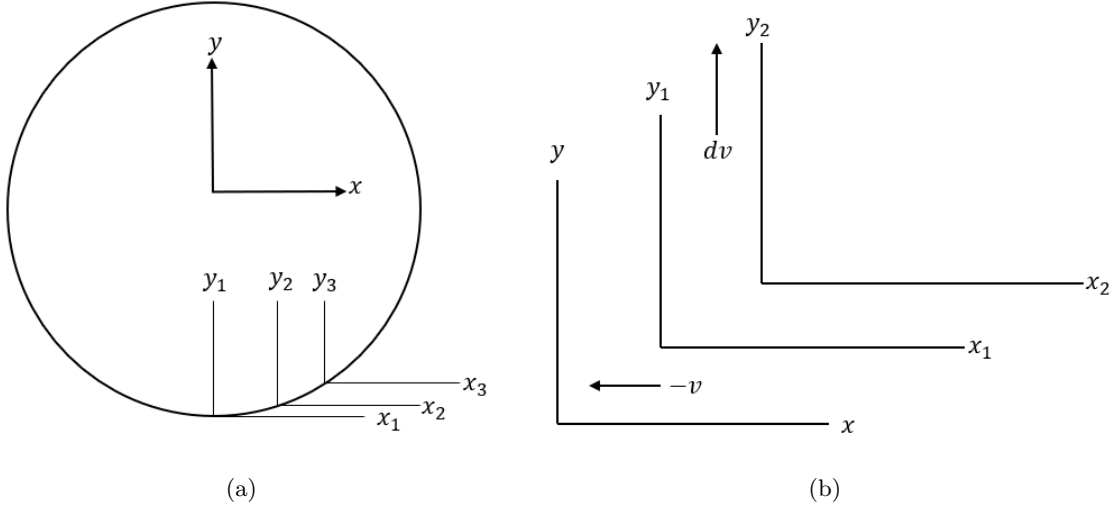


FIGURA 2.14: (a) Marcos de referencia usados para calcular la precesión de Thomas y (b) marcos de referencia vistos desde el marco de referencia x_1 y y_1 .

Usando las transformaciones de las velocidades

$$V'_x = \frac{V_x - v}{1 - \frac{v}{c^2} V_x}, \quad V'_y = \frac{V_y \sqrt{1 - \beta^2}}{1 - \frac{v}{c^2} V_x} \quad (2.45)$$

$$V_x = \frac{V'_x + v}{1 + \frac{v}{c^2} V'_x}, \quad V_y = \frac{V'_y \sqrt{1 - \beta^2}}{1 + \frac{v}{c^2} V'_x} \quad (2.46)$$

Evaluamos la velocidad V_a , la velocidad de $x_2 y_2$ respecto a xy

$$V_{ax} = v \quad (2.47)$$

$$V_{ay} = dv \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (2.48)$$

De la misma manera para la velocidad V_b , la velocidad de xy respecto a $x_2 y_2$

$$V_{bx} = -v \sqrt{1 - \frac{dv^2}{c^2}} \quad (2.49)$$

$$V_{by} = -dv \quad (2.50)$$

Se observa que la magnitud de V_a y V_b son iguales lo cual concuerda con el postulado de Einstein sobre la equivalencia de los marcos inerciales.

$$|V_a| = |V_b| \quad (2.51)$$

Si calculamos el ángulo que forma V_a con el eje x del marco xy y V_b con el eje x del marco x_2y_2 .

$$\theta_a = \frac{V_{ay}}{V_{ax}} = \frac{dv\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}{v} \quad (2.52)$$

$$\theta_b = \frac{V_{by}}{V_{bx}} = \frac{dv}{v\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (2.53)$$

con lo cual, despreciando $\frac{dv^2}{c^2}$

$$d\theta = \theta_b - \theta_a = \frac{dv}{v} \left[1 - \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \right] \quad (2.54)$$

Haciendo el desarrollo binomial

$$d\theta = \frac{v dv}{2c^2} = \frac{v a dt}{2c^2} \quad (2.55)$$

Por tanto la frecuencia angular, frecuencia de Thomas está dada por

$$\omega_T = \frac{d\theta}{dt} = \frac{va}{2c^2} \quad (2.56)$$

De forma vectorial

$$\omega_T = -\frac{1}{2c^2} \vec{v} \times \vec{a} \quad (2.57)$$

En los marcos donde el electrón se encuentra en reposo, su momento magnético de espín tiene una precesión ω_L y a su vez tienen una precesión ω_T respecto al marco donde el núcleo se encuentra en reposo.

$$\omega = \omega_L + \omega_T \quad (2.58)$$

Entonces

$$\omega_L = -\frac{g_s \mu_B}{c\hbar} \vec{v} \times \vec{E} \quad (2.59)$$

Reemplazando en la ecuación (2.36) con $g_s = 2$

$$\omega_L = -\frac{e}{mc^2} \vec{v} \times \vec{E} \quad (2.60)$$

Para ω_T usamos la segunda ley de Newton

$$\vec{a} = -\frac{e\vec{E}}{m} \quad (2.61)$$

Reemplazando la ecuación (2.57)

$$\omega_T = \frac{e}{2mc^2} \vec{v} \times \vec{E} \quad (2.62)$$

La frecuencia de precesión en el marco normal

$$\omega = -\frac{e}{2mc^2} \vec{v} \times \vec{E} \quad (2.63)$$

De las ecuaciones (2.60) y (2.63) observamos que al transformar la frecuencia de precesión del espín en el marco donde el electrón está en reposo al marco normal, su magnitud se reduce a la mitad.

Por tanto debería suceder lo mismo para la energía potencial

$$E_{SL}^{(1)} = \frac{1}{2} \frac{g_s \mu_B}{\hbar} \vec{S} \cdot \vec{B} \quad (2.64)$$

Buscamos expresar en términos de $\vec{S} \cdot \vec{L}$, usaremos la ecuación (2.31) para lo cual expresamos \vec{E} en función de la fuerza ejercida sobre el electrón.

$$\vec{F} = -e\vec{E} \quad (2.65)$$

El potencial de Coulomb del núcleo

$$\vec{F} = -\frac{dV(r)}{dr} \frac{\vec{r}}{r} \quad (2.66)$$

Reemplazando

$$\vec{B} = -\frac{1}{ec^2 r} \frac{dV(r)}{dr} \vec{v} \times \vec{r} = -\frac{1}{emc^2 r} \frac{dV(r)}{dr} \vec{L} \quad (2.67)$$

y si reemplazamos la ecuación (2.67) en la (2.64)

$$E_{SL}^{(1)} = \frac{1}{2} \frac{g_s \mu_B}{emc^2 r \hbar} \frac{dV(r)}{dr} \vec{S} \cdot \vec{L} \quad (2.68)$$

Reemplazando la ecuación (2.36) y $g_s = 2$

$$E_{SL}^{(1)} = \frac{1}{2m^2 c^2 r} \frac{dV(r)}{dr} \vec{S} \cdot \vec{L} \quad (2.69)$$

Para átomos hidrogenoides el potencial sera

$$V(r) = -k \frac{Ze^2}{r} \quad (2.70)$$

Entonces

$$E_{SL}^{(1)} = \frac{1}{2m^2c^2} k \frac{Ze^2}{r^3} \vec{S} \cdot \vec{L} \quad (2.71)$$

Donde

$$\xi(r) = \frac{1}{2m^2c^2} k \frac{Ze^2}{r^3} \quad (2.72)$$

Por tanto el hamiltoniano tendra la siguiente forma

$$H_{SL} = \xi(r) S \cdot L \quad (2.73)$$

Si consideramos el momento angular total del electrón

$$J = L + S \quad (2.74)$$

Si elevamos al cuadrado

$$J^2 = L^2 + 2L \cdot S + S^2 \longrightarrow L \cdot S = \frac{1}{2} (J^2 - L^2 - S^2) \quad (2.75)$$

Teniendo en cuenta

$$H_0 \Psi_{nljm_j}^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_{nljm_j}^{(0)} \quad , \quad L^2 \Psi_{nljm_j}^{(0)} = l(l+1) \hbar^2 \Psi_{nljm_j}^{(0)} \quad (2.76)$$

$$S^2 \Psi_{nljm_j}^{(0)} = \frac{3}{4} \hbar^2 \Psi_{nljm_j}^{(0)} \quad , \quad J^2 \Psi_{nljm_j}^{(0)} = j(j+1) \hbar^2 \Psi_{nljm_j}^{(0)} \quad (2.77)$$

$$J_z \Psi_{nljm_j}^{(0)} = m_j \hbar \Psi_{nljm_j}^{(0)} \quad (2.78)$$

Por tanto

$$E_{SL}^{(1)} = \left\langle \Psi_{nljm_j}^{(0)} \left| \frac{1}{2} \xi(r) (J^2 - L^2 - S^2) \right| \Psi_{nljm_j}^{(0)} \right\rangle \quad (2.79)$$

$$E_{SL}^{(1)} = \frac{\hbar^2}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \langle \xi(r) \rangle \quad (2.80)$$

Donde

$$\langle \xi(r) \rangle = \left\langle \Psi_{nljm_j}^{(0)} \left| \frac{1}{2m^2c^2} k \frac{Ze^2}{r^3} \right| \Psi_{nljm_j}^{(0)} \right\rangle = \frac{kZe^2}{2m^2c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \quad (2.81)$$

con lo cual obtenemos

$$\langle \xi(r) \rangle = \frac{kZe^2}{2m^2c^2} \frac{Z^3}{a_{03}^3 l(l + \frac{1}{2})(l + 1)} \quad (2.82)$$

Por último, para $l \neq 0$ tenemos

$$E_{SL}^{(1)} = \left| E_n^{(0)} \right| \frac{(Z\alpha)^2}{2nl(l + \frac{1}{2})(l + 1)} \times \begin{cases} l, \text{ para } j = l + \frac{1}{2} \\ -l - 1, \text{ para } j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (2.83)$$

2.4.2. Interacción espín-órbita en el Carbono

Para este caso se hará la descripción desde el punto de vista de la espectroscopía electrónica [Cru86].

Tenemos en cuenta que el átomo de carbono tiene la siguiente configuración electrónica

$$1s^2 2s^2 2p^2 \quad (2.84)$$

Donde $1s^2 2s^2$ se refieren a la primera capa (capa K), mientras que $2p^2$ a la capa externa (capa L).

La capa K se encuentra llena por tanto posee $L = 0$ y $S = 0$, es por ello que no contribuye a los términos espectroscópicos. Por otro lado, la capa L si contribuye

$$2p^2 \longrightarrow n = 2 \begin{cases} l_1 = 1 \\ l_2 = 2 \end{cases} \quad (2.85)$$

Si calculamos los microestados

$$\Omega = \frac{m!}{(m-n)!n!} = \frac{6!}{4!2!} = 15 \quad (2.86)$$

Podemos hacer la clasificación de los microestados (ver cuadro 2.1)

m_l			Momentos totales	
1	0	-1	$M_L = \sum m_l$	$M_S = \sum m_s$
↑	↑		1	1
↑		↑	0	1
	↑	↑	-1	1
↑↓			2	0
	↑↓		0	0
		↑↓	-2	0
↓	↓		1	-1
↓		↓	0	-1
	↓	↓	-1	-1
↑	↓		1	0
↑		↓	0	0
	↑	↓	-1	0
↓	↑		1	0
↓		↑	0	0
	↓	↑	-1	0

CUADRO 2.1: Clasificación de los microestados $2p^2$

De lo cual debemos tener en cuenta que

$$^{2S+1}L, L = \begin{cases} 0 & 1 & 2 \\ S & P & D \end{cases} \quad (2.87)$$

Donde ^{2S+1}L es el término espectrocópico.

Además debe cumplirse la condición

$$|L - S| \leq J \leq L + S \quad (2.88)$$

Haciendo un análisis de la clasificación de microestados, se observa que se agrupan. El primer grupo contiene solo un microestado con $M_S = 0$ y $M_L = 0$

$$S = 0 \wedge L = 0 \longrightarrow J = 0 \quad (2.89)$$

$$^1S_0 \quad (2.90)$$

Otro grupo contiene 5 microestados con $M_S = 0$ y $M_L = -2, -1, 0, 1, 2$

$$S = 0 \wedge L = 2 \longrightarrow J = 2 \quad (2.91)$$

$$^1D_2 \quad (2.92)$$

El último grupo contiene 9 microestados con $M_S = -1, 0, 1$ y $M_L = -1, 0, 1$

$$S = 1 \wedge L = 1 \longrightarrow J = 0, 1, 2 \quad (2.93)$$

$$^3P_{2,1,0} \quad (2.94)$$

Con lo cual podemos observar la configuración para el caso $2p^2$

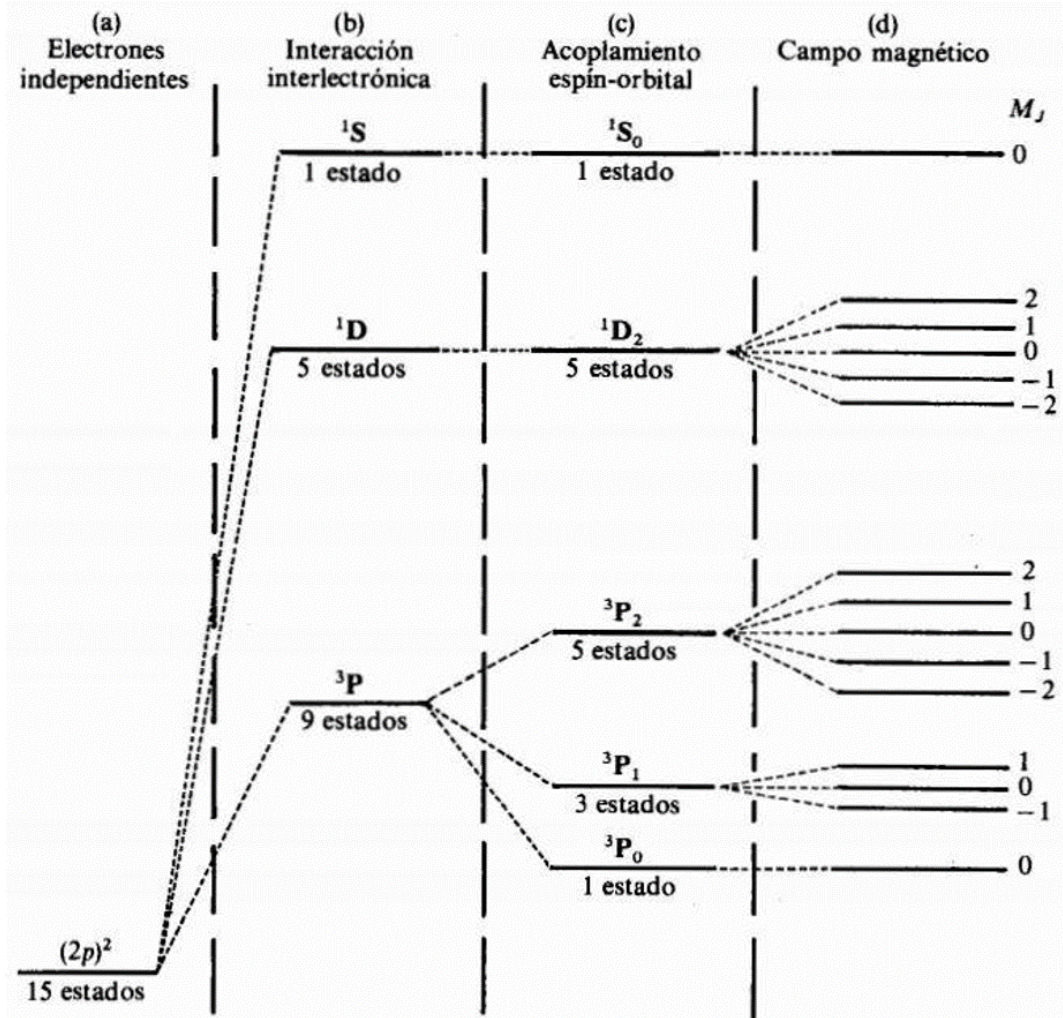


FIGURA 2.15: Configuración $2p^2$ [Cru86].

2.4.3. Interacción espín-órbita en el grafeno

Este fenómeno relativista puede ser obtenido a partir de la ecuación de Dirac, se da debido al acoplamiento que existe entre el espín del electrón y un campo eléctrico local debido a campos eléctricos internos o externos, en forma general

$$H_{SO} = \frac{\mu_B}{2mc^2} \vec{E} \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{p}) \quad (2.95)$$

Si se introduce un campo magnético efectivo

$$\vec{B}_R \sim \vec{E} \cdot (\vec{p} \times \hat{z}) \quad (2.96)$$

llamado campo Rashba debe ser paralelo al plano del grafeno, como consecuencia se induce una precesión del espín del electrón con una frecuencia (frecuencia de Larmor).

Entonces desde el hamiltoniano relativista de la ecuación de Dirac:

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (2.97)$$

con

$$H = \begin{pmatrix} 0 & c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} mc^2 & 0 \\ 0 & mc^2 \end{pmatrix} + V \quad (2.98)$$

La solución de la ecuación de Dirac es una función de onda con dos componentes (espinores) $|\Psi\rangle = (\Psi_A, \Psi_B)^T$

$$\Psi_B = \frac{c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{E - V + mc^2} \Psi_A \quad (2.99)$$

$$\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \frac{c^2}{E - V + mc^2} \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \Psi_A = (E - V + mc^2) \Psi_A \quad (2.100)$$

En el límite no relativista, podremos observar que Ψ_B es mucho más pequeño que Ψ_A . Por tanto si tenemos en cuenta $V \ll mc^2$ y

$$E = mc^2 + \epsilon \quad (2.101)$$

La ecuación (2.31) se escribirá como

$$\Psi_B = \frac{\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{2mc} \Psi_A \ll \Psi_A \quad (2.102)$$

Si se considera los ordenes más bajos en $\frac{v}{c}$, podremos ver que la ecuación (2.32) se reducirá a la ecuación de Schrodinger.

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V \right) \Psi_A = \epsilon \Psi_A \quad (2.103)$$

Pero en los ordenes más altos de $\frac{v}{c}$, debemos considerar la condición de normalización

$$\int (\Psi_A^\dagger \Psi_A + \Psi_B^\dagger \Psi_B) = 1 \quad (2.104)$$

y si usamos la ecuación (2.34) para reemplazar Ψ_B

$$\int \Psi_A^+ \left(1 + \frac{p^2}{4m^2c^2} \right) \Psi_A = 1 \quad (2.105)$$

Cuando $\Psi = \left(1 + \frac{p^2}{8m^2c^2} \right) \Psi_A$ la función de onda queda normalizada. Al sustituirlo en la ecuación de Dirac, en el cual haremos uso de una expansión para $\frac{c^2}{E-V+mc^2}$

$$\frac{1}{2m} \left(1 - \frac{\epsilon - V}{2mc^2} + \dots \right) \quad (2.106)$$

Con lo cual obtenemos la ecuación de Pauli

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V - \frac{p^4}{8m^3c^2} - \frac{\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times \nabla V + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla^2 V \right) \Psi = \epsilon \Psi \quad (2.107)$$

donde

$$H = \frac{p^2}{2m} + V - \frac{p^4}{8m^3c^2} - \frac{\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times \nabla V + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla^2 V \quad (2.108)$$

Los dos primeros términos del hamiltoniano están asociados al hamiltoniano no relativista, mientras que el tercer término se refiere a una corrección relativista de la energía cinética, el cuarto término es el del acoplamiento espín-órbita y el último término se refiere a un cambio de energía inducido por un potencial.

El término interesante es el del acoplamiento espín-órbita (SOC), este podríamos obtenerlo a partir de la consideración de que un electrón se mueve con una velocidad v bajo la acción de un campo eléctrico $-eE = -\nabla V$. Este electrón de manera equivalente también se somete a un campo magnético efectivo en su sistema de reposo $B = -v \times \frac{E}{c}$, de donde la energía de interacción es

$$V_{\mu_s} = -\mu_s B = -\frac{g_s \mu_B}{2ec} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{v} \times \nabla V \quad (2.109)$$

$$= -\frac{g_s \hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{v} \times \nabla V = -\frac{\hbar}{2m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times \nabla V \quad (2.110)$$

Este último resultado duplica el término de SOC que aparece en la ecuación de Pauli, esta diferencia ya ha sido explicada por Thomas. La explicación se basa en el hecho que el electrón se encuentra en un marco de referencia rotatorio, el cual conduce a la precesión del espín bajo la influencia de un campo magnético

$$B = -\frac{v \times E}{2c} \quad (2.111)$$

el cual produce el término de SOC

$$V_{SOC} = -\frac{\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times \nabla V \quad (2.112)$$

y si lo expresamos en función de la fuerza F

$$H_{SOC} = \alpha(F \times p) \cdot s = -\alpha(s \times p) \cdot F \quad (2.113)$$

Capítulo 3

Resultados

3.1. Estructura electrónica

Un primer resultado importante para la comprensión de las propiedades electrónicas que presenta el grafeno es la simulación de su estructura electrónica, como se puede observar en la figura 3.1.

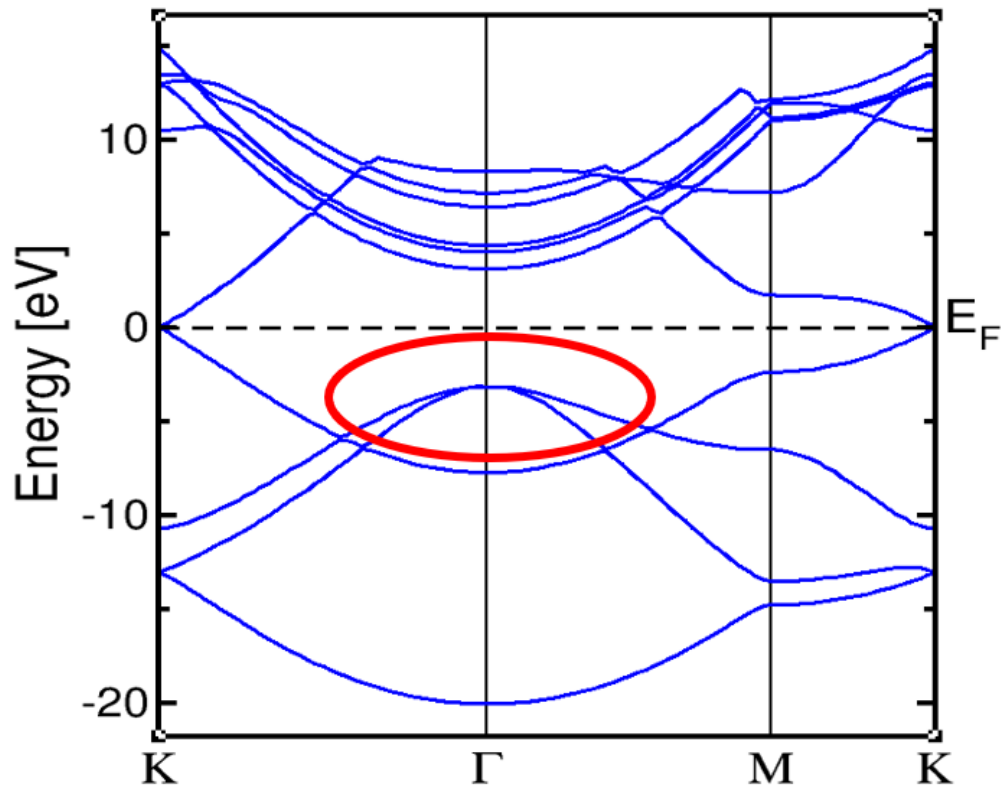


FIGURA 3.1: Simulación de la estructura electrónica del grafeno con SOC.

De donde se puede observar claramente que el gap de este material es de 0 eV (no hay gap). Esto es posible identificar ya que las bandas que están representadas por los orbitales p_z (en color rojo de la figura 4.1), que como habíamos mencionado en las sección anterior son los responsables de las propiedades electrónicas, se cruzan exactamente en el nivel de la enegía de Fermi (E_F).

También se debe tener en cuenta lo mostrado en la ecuación (2.24), que como vemos se corrobora en la estructura de bandas donde los puntos de cruces son exactamente los puntos de alta simetría K_+ y K_- y que como consecuencia el comportamiento de los electrones es el de fermiones de Dirac sin masa.

Pero lo que es de nuestro interés, el acoplamiento espín-órbita es posible visualizarlo en la figura 4.1 (zona encerrada de color rojo), la cual señala las bandas de los enlaces sigma. Aquí se observa, mediante un análisis más riguroso, que existe un gap de 9 meV y en lo que respecta a los enlaces π y π^* el gap será de $0,8 \times 10^{-3} \text{ meV}$, lo cual es una buena estimación obtenida desde el modelo Tight binding.

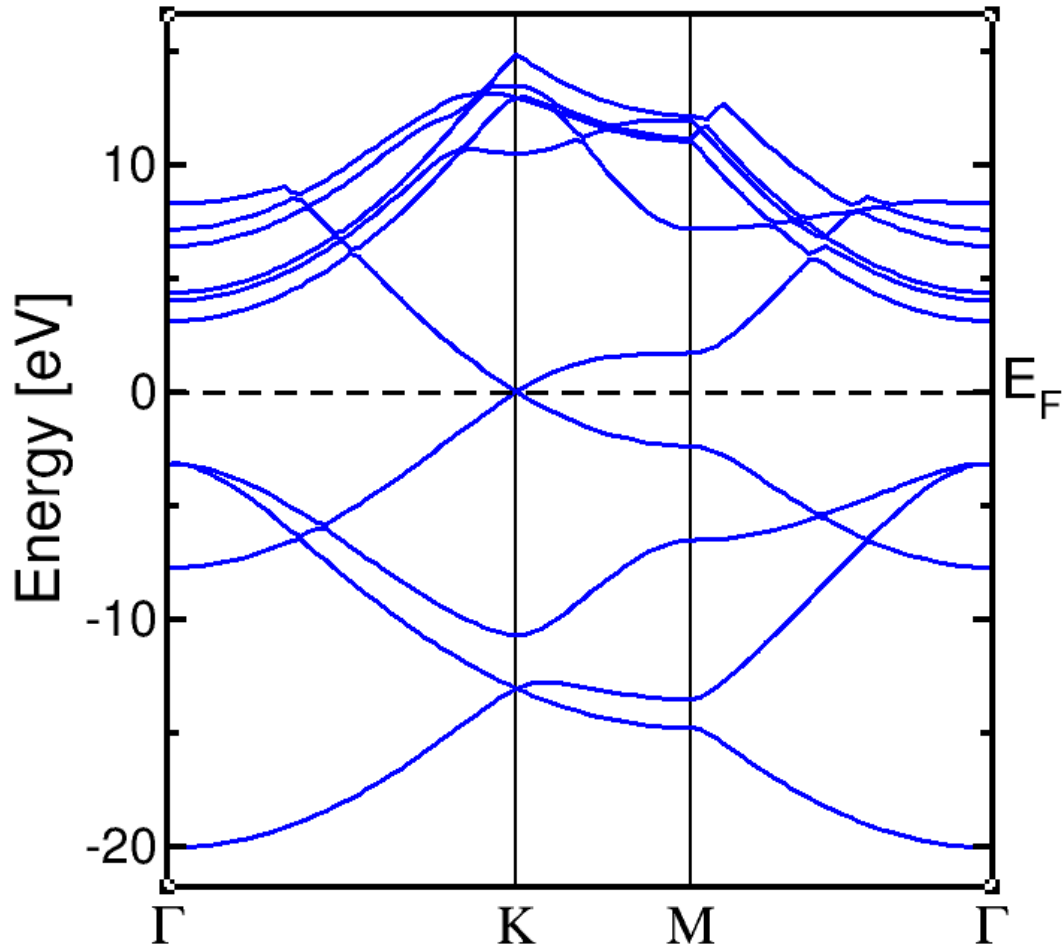


FIGURA 3.2: Simulación de la estructura electrónica con SOC en diferente dirección.

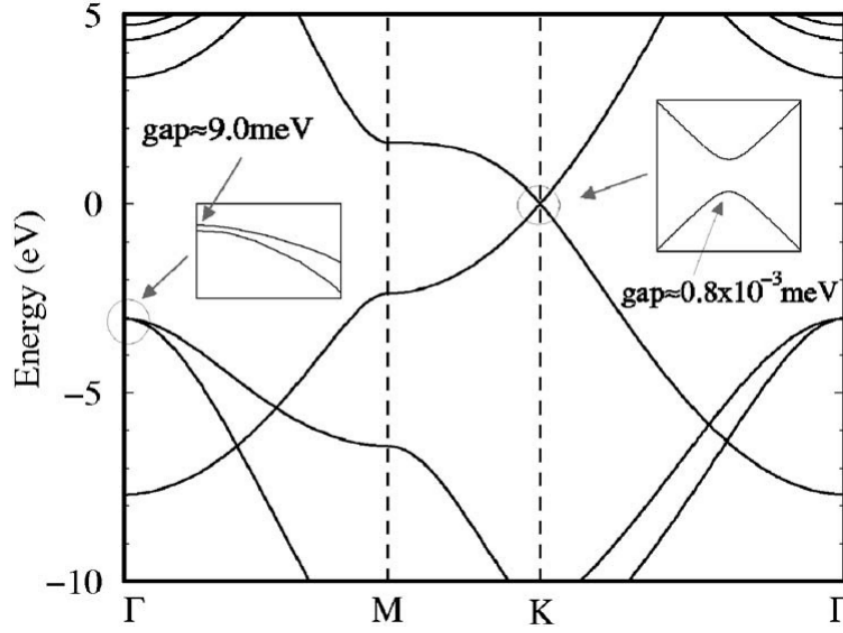


FIGURA 3.3: Estructura electrónica con SOC, donde se muestra los gaps en las bandas de los enlaces σ y π [Yao07].

Si comparamos la simulación realizada (ver figura 4.2) y la estructura electrónica obtenida por Yao (ver figura 4.3) podemos observar que hemos realizado una buena aproximación, inclusive en cuanto a los gaps que se forman que como se puede ver son bastante pequeños.

3.2. Densidad de estados (DOS)

La DOS es proporcional a E y se desvanece cuando $E = 0$, como se ve en la figura 4.4. Estos estados electrónicos afectan a la física de bajas temperaturas y bajas energías del grafeno ya que la energía de fermi está dada por $E = 0$.

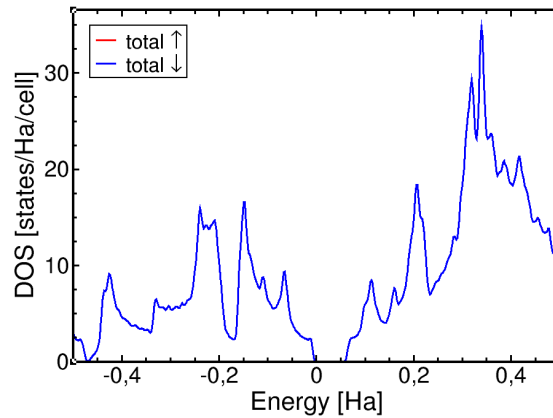


FIGURA 3.4: DOS del grafeno.

3.2.1. Subsection 2

3.3. Main Section 2

Capítulo 4

Conclusiones

4.1. Main Section 1

4.1.1. Subsection 1

4.1.2. Subsection 2

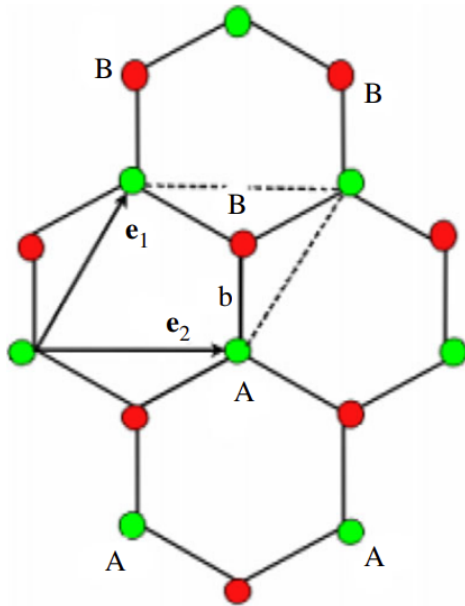
4.2. Main Section 2

Anexo A

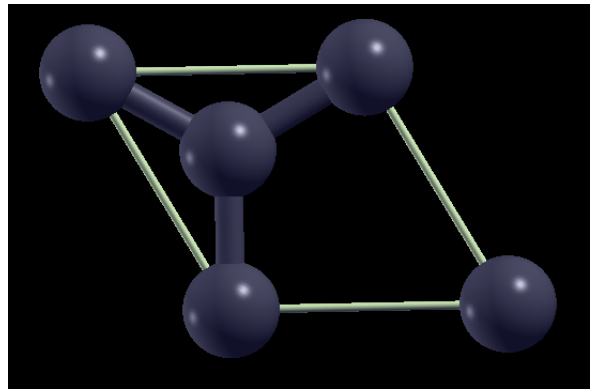
Celda unitaria del grafeno

Ya tenemos el conocimiento que el grafeno es un material bidimensional, para el cual podemos considerar que los vectores primitivos de la red forman una celda rómbica que contiene una base con dos átomos (A y B) como se puede observar en la Figura A.1.a.

Para poder simular dicha celda, como se muestra en la Figura A.1.b, se debe incluir en el código la posición de los átomos que la componen, esto se puede observar en la sección estructura (structure) del código que se muestra en el Anexo B.



(a)



(b)

FIGURA A.1: (a) Celda unitaria con base de dos átomos [Dav18] y (b) Simulación de la celda unitaria hecho en Exciting Code.

Pero nos enfrentamos a un problema, ya que en el software solo es posible simular estructuras tridimensionales (ver figura A.2).

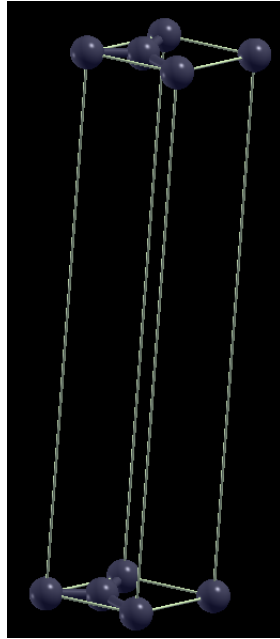


FIGURA A.2: Celda unitaria tridimensional.

Para salvar este problema se debe considerar la constante de red que separa ambas capas de grafeno (capa superior e inferior de la figura A.2) en la celda unitaria tridimensional lo suficientemente grande como para despreciar la interacción entre ellas.

Esto nos permite estudiar las propiedades del material con ayuda del software sin ningún problema.

Anexo B

Simulación de la estructura de bandas y DOS

El código para la simulación de la estructura de bandas esta compuesto de la siguiente manera:

```
<input>

<title>Graphene</title>

<structure speciespath="/home/joseph/tutorials/exciting/species">

  <crystal scale="4,65">

    <basevect> 0,5 0,8660254040 0,0 </basevect>

    <basevect> -0,5 0,8660254040 0,0 </basevect>

    <basevect> 0,0 0,0000000000 6,0 </basevect>

  </crystal>

  <species speciesfile="C.xml" rmt="1,20">

    <atom coord="0,00000000 0,00000000 0,0"/>

    <atom coord="0,33333333 0,33333333 0,0"/>

  </species>

</structure>

<groundstate
```

```

do="fromscratch"

xctype="GGA_PBE"

ngridk="881"

rgkmax="4"

swidth="0,01">

<spin

  bfieldc="0,0  0,0  0,5"

  reducebf="0,5"

  spinorb= "true">

</spin>

</groundstate>

<properties>

  <bandstructure>

    <plot1d>

      <path steps="100">

        <point coord="0,33333333  - 0,33333333  0,0" label="K"      / >

        <point coord="0,0          0,0          0,0" label="GAMMA" / >

        <point coord="0,0          - 0,5          0,0" label="M"      / >

        <point coord="0,33333333  - 0,33333333  0,0" label="K"      / >

      </path>

    </plot1d>

  </bandstructure>

</properties>

</input>

```

Mientras que para el caso de la simulación de la DOS, se debe hacer una modificación en la sección de propiedades (<properties>) reemplazándolo por

```
<properties>
```

```
  <dos nsmdos="3"/>
```

```
</properties>
```

Referencias

- [Ape18] Apellido, N. (2018). Ejemplo de Artículo en Formato APA. *Rev. Inv. Fis.*, 21(1), pp 18-26.
- [Ben18] Benny, H. y Pérez, J. (2018). *Título de Libro en Formato APA*. Lima: Editorial San Marcos.
- [Cro92] Cros, A. y Muret, P. (1992). Properties of noble-metal/silicon junctions, *Mater. Sci. Rep.* **8**, 271.
- [Ide07] Ide, S. (2007). Slip Inversion. *Treatise on Geophysics*. En H. Kanamori (Ed.), *Treatise on Geophysics* (pp 193-223). Amsterdam: Elsevier Science.
- [Kik03] Kikuchi, M. and Kanamori, H. (2003) Notes on Teleseismic Body-Wave Inversion Program, web: <http://www.eri.u-tokyo.ac.jp/ETAL/KIKUCHI/>
- [Oka92] Okada, Y. (1992). Internal deformation due to shear and tensile faults in a half space. *BSSA*, Vol. 82, No. 2, pp 1018-1040.
- [Pul99] Pulker, H. (1999). *Coatings On Glass*, Segunda edición. Amsterdam: Elsevier Science.