

UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERÍA
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA PROFESIONAL DE FÍSICA



SIMETRÍAS DEL HAMILTONIANO DE DIRAC EN EL GRAFENO

PROYECTO DE TESIS I

Estudiante:

César Octavio Lévano Apari

Asesor:

Prof. Dr. Daniel Eduardo Soto Barrientos

Enero 2025

Agradecimientos

Resumen

...

Índice general

Resumen	III
1. Introducción	1
2. Bandas de energía en el grafeno	3
2.1. Estructura cristalina	3
2.1.1. Elementos de la estructura cristalina	3
2.1.2. Propiedades de simetría	5
2.2. Grupo de simetría	6
2.3. Función de onda	7
2.3.1. Aspectos generales de la función de onda	7
2.3.2. Aproximación tight-binding	9
2.3.3. Función de onda de Bloch	9
2.4. Bandas de energía	13
2.4.1. Espectro de energía	13
2.4.2. Espectro de energía alrededor de los puntos de Dirac	15
3. Campo de Dirac en el grafeno	17
3.1. Identificación del campo de Dirac	17
3.1.1. Hamiltoniano y matrices de Dirac	17
3.1.2. Campo de Dirac	18
3.2. Transformaciones del campo de Dirac	19
3.2.1. Transformaciones de Lorentz	19
3.2.2. Transformaciones de Lorentz del campo de Dirac	20
4. Conclusiones y Perspectivas	22
A. Demostración del teorema de Bloch	24
Bibliografía	25

Capítulo 1

Introducción

Capítulo 2

Bandas de energía en el grafeno

En este capítulo se estudiará la estructura cristalina del grafeno, la cual al no ser una red de Bravais tiene propiedades de simetría distintas que surgen debido a que su celda de Wigner-Seitz tiene dos elementos. Estas características modifican el enfoque que se usa, por ejemplo al hallar la función de onda de Bloch del sistema, esta debe estar expresada como una combinación lineal de las dos sub-redes formadas por cada elemento de la celda de Wigner-Seitz, a diferencia del caso de una red de Bravais cuyas celdas de Wigner-Seitz constan de un elemento, por lo que su función de onda de Bloch no depende de dos sub-redes.

Para describir la dinámica de los electrones en el grafeno se usa el modelo del Tight-Binding. Sin embargo para hacer esto es necesario definir los electrones cuyos comportamientos serán descritos. Estos serán los electrones que ocupan los orbitales p_z de los átomos de carbono, y solo se considerarán las interacciones entre estos y los iones positivos de la red cristalina, cuyos elementos son los núcleos y los demás electrones del átomo de carbono.

A partir de esto se observará que existen dos bandas de energía, las cuales se intersectan en los llamados *puntos de Dirac*. Estos son iguales a los puntos de la red recíproca del grafeno, por lo que se tienen dos clases de puntos de Dirac, los cuales tienen Hamiltonianos distintos como se verá en el siguiente capítulo.

2.1. Estructura cristalina

2.1.1. Elementos de la estructura cristalina

El grafeno es un material bidimensional formado por átomos de carbono que se encuentran unidos mediante enlaces tipo σ , formando así un arreglo hexagonal como se muestra en la Figura 2.1.

La celda unitaria de una estructura cristalina es definida como una porción de la red, la cual genera la estructura cristalina. Esta definición permite definir diferentes tipos de celda unitarias para el grafeno, siendo la más evidente la celda en forma de hexágono con átomos de carbono en sus vértices. Sin embargo, existe otro tipo de celda unitaria, llamada *celda de Wigner-Seitz*, la cual será la utilizada para estudiar la estructura cristalina del grafeno. Esta es la celda que rodea a un punto de la estructura cristalina tal que los vectores que van desde este hacia los puntos más cercanos intersectan de forma perpendicular a los lados de la celda, dividiendo a la mitad a estos vectores. Para el caso del grafeno esta tiene la forma de un paralelogramo, aunque existen

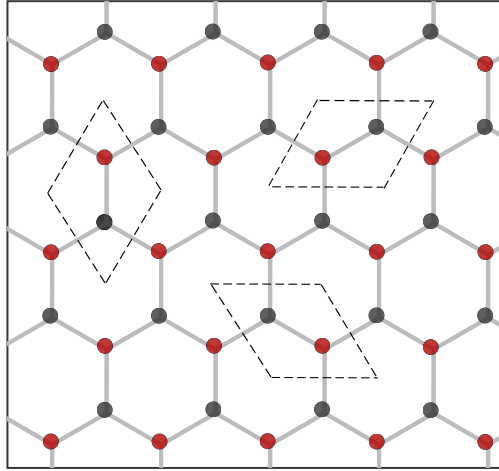


Figura 2.1: Estructura cristalina y las celdas de Wigner-Seitz del grafeno

tres orientaciones distintas para estas (ver Fig. 2.1), con dos puntos de la red contenidos en este. Esto permite clasificar los puntos de la red cristalina en dos clases, las cuales forman dos redes triangulares.

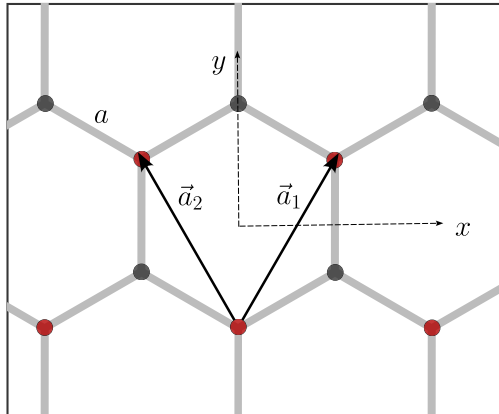


Figura 2.2: Vectores primitivos de la estructura cristalina del grafeno

Dado que los vectores primitivos son definidos como los vectores que conectan dos puntos consecutivos de una estructura cristalina, los vectores primitivos asociados a cada sub-red triangular serán \vec{a}_1 y \vec{a}_2 (ver Fig. 2.2). Estos se pueden representar en la base $\{\hat{x}, \hat{y}\}$ como

$$\vec{a}_1 = \frac{a\sqrt{3}}{2} (\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y}), \quad \vec{a}_2 = \frac{a\sqrt{3}}{2} (-\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y}) \quad (2.1)$$

Al desplazar la celda de Wigner-Seitz en un vector que es igual a una combinación lineal de coeficientes enteros de los vectores primitivos se puede generar la estructura cristalina del grafeno. Por lo que estos vectores serán de utilidad cuando se estudien las propiedades de simetría de la estructura cristalina.

La red cristalina está expresada en el espacio de posiciones, esto no es conveniente cuando se requiere una expresión que no dependa de estas. Al realizar el cambio a el espacio de vectores

de onda \vec{k} , la red cristalina asociada a este tiene como vectores primitivos a \vec{a}_1^* y \vec{a}_2^* , los cuales satisfacen la relación

$$\vec{a}_i^* \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2). \quad (2.2)$$

para poder mantener la periodicidad de la red cristalina. Esta red cristalina es llamada *red recíproca*.

Los vectores primitivos de la red recíproca se pueden expresar en la base $\{\hat{x}, \hat{y}\}$ como

$$\vec{a}_1^* = \frac{2\pi}{3a} (\sqrt{3}\hat{x} + \hat{y}), \quad \vec{a}_2^* = \frac{2\pi}{3a} (-\sqrt{3}\hat{x} + \hat{y}). \quad (2.3)$$

A continuación se muestran los puntos de la red recíproca más cercanos al origen de coordenadas

$$\begin{aligned} \vec{k} &= \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \hat{x} & \vec{k} &= \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \hat{x} + \frac{2\pi}{3a} \hat{y} & \vec{k} &= \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \hat{x} - \frac{2\pi}{3a} \hat{y} \\ \vec{k} &= -\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \hat{x} & \vec{k} &= -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \hat{x} + \frac{2\pi}{3a} \hat{y} & \vec{k} &= -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \hat{x} - \frac{2\pi}{3a} \hat{y} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Para el caso de la red recíproca, la celda de Wigner-Seitz es llamada *zona de Brillouin*. Esta tiene la forma de un paralelogramo que contiene dos puntos de la red recíproca, ya que la red recíproca tiene un arreglo hexagonal, al igual que la estructura cristalina. Por ende, la red recíproca se pueden dividir en dos sub-redes triangulares y tiene las mismas propiedades de simetría que la estructura cristalina inicial.

2.1.2. Propiedades de simetría

El grafeno tiene ciertas transformaciones de simetría que se definen como aquellas que dejan invariante a la estructura cristalina.

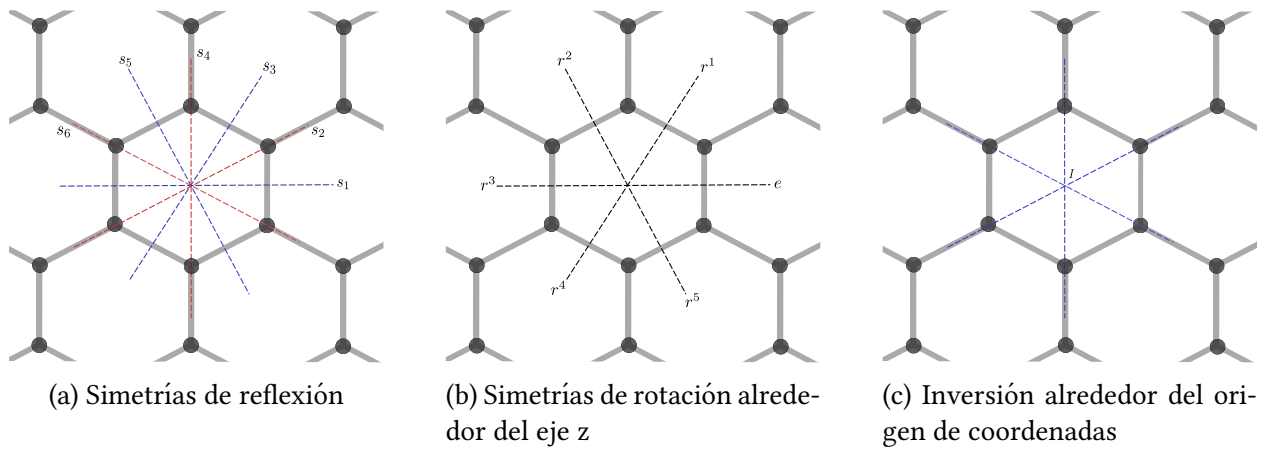


Figura 2.3: Simetrías de reflexión, rotación e inversión del grafeno

Las reflexiones de la Figura 2.3a se pueden representar en la base $\{\hat{x}, \hat{y}\}$ como

$$\begin{aligned} s_1 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} & s_2 &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} & s_3 &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ s_4 &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & s_5 &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} & s_6 &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.5)$$

Y las rotaciones de la Figura 2.3b se puede representar como

$$\begin{aligned} e &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & r^1 &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} & r^2 &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ r^3 &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} & r^4 &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} & r^5 &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.6)$$

Por último la simetría de inversión (ver Fig. 2.3c) es representada por

$$I = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Se puede notar que la matriz que representa a la simetría de inversión es la misma que la que representación a la rotación r^3 . Por lo que al realizar el análisis de las simetrías del grafeno la simetría de inversión no se mencionará como tal, sino como una de las simetrías de rotación.

Además de las simetrías anteriores que dejan un punto invariante, como el eje de coordenadas, existen otras que no fijan un punto en particular. Por ende, estas no pueden representadas por un transformación lineal, sino por una transformación afín. Unas de estas son las simetrías de traslación, las cuales para el caso de una estructura cristalina hexagonal son

$$T = \{\vec{w} \mid \vec{w} = \alpha \vec{a}_1 + \beta \vec{a}_2, \text{ donde } \alpha, \beta \in \mathbb{Z}\} \quad (2.8)$$

2.2. Grupo de simetría

Los simetrías que mantienen un punto fijo satisfacen las relaciones

	e	r^1	r^2	r^3	r^4	r^5	s_1	s_2	s_3	s_4	s_5	s_6
e	e	r^1	r^2	r^3	r^4	r^5	s_1	s_2	s_3	s_4	s_5	s_6
r^1	r^1	r^2	r^3	r^4	r^5	e	s_2	s_3	s_4	s_5	s_6	s_1
r^2	r^2	r^3	r^4	r^5	e	r^1	s_3	s_4	s_5	s_6	s_1	s_2
r^3	r^3	r^4	r^5	e	r^1	r^2	s_4	s_5	s_6	s_1	s_2	s_3
r^4	r^4	r^5	e	r^1	r^2	r^3	s_5	s_6	s_1	s_2	s_3	s_4
r^5	r^5	e	r^1	r^2	r^3	r^4	s_6	s_5	s_4	s_3	s_2	s_1
s_1	s_1	s_6	s_5	s_4	s_3	s_2	e	r^5	r^4	r^3	r^2	r^1
s_2	s_2	s_1	s_6	s_5	s_4	s_3	r^1	e	r^5	r^4	r^3	r^2
s_3	s_3	s_2	s_1	s_6	s_5	s_4	r^2	r^1	e	r^5	r^4	r^3
s_4	s_4	s_3	s_2	s_1	s_6	s_5	r^3	r^2	r^1	e	r^5	r^4
s_5	s_5	s_4	s_3	s_2	s_1	s_6	r^4	r^3	r^2	r^1	e	r^5
s_6	s_6	s_5	s_4	s_3	s_2	s_1	r^5	r^4	r^3	r^2	r^1	e

Por ende, estos forman un grupo. Este grupo es conocido como el *grupo diédrico* del hexágono, y es denotado por D_6 . Este es el grupo puntual de una estructura cristalina hexagonal. Es evidente que es un grupo finito, pero al hallar la suma directa con el grupo T se genera el *grupo espacial* de la estructura hexagonal. Este es un grupo infinito, ya que el grupo T tiene infinitos elementos.

2.3. Función de onda

2.3.1. Aspectos generales de la función de onda

Antes de describir el comportamiento de los electrones en el grafeno es necesario mostrar el marco teórico que rige su dinámica. Empezando con una partícula, su estado es definido matemáticamente como un elemento de un espacio de Hilbert \mathcal{H} ya la familia de estos genera ese espacio de Hilbert. Este se define como el conjunto de la funciones cuadrado-integrables

$$\mathcal{H} = \left\{ \phi(\vec{r}) \mid \int |\phi(\vec{r})|^2 d\vec{r} < \infty \right\} \quad (2.9)$$

con el producto interno

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int \phi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.10)$$

Si el estado está normalizado, este puede ser usado para hallar la probabilidad de encontrar a la partícula en un determinado volumen. Así, $|\phi(\vec{r})|^2$ es la densidad de probabilidad.

La dinámica de la partícula es determinada por la *ecuación de Schrödinger*

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, t) = H \phi(\vec{r}, t). \quad (2.11)$$

Cuando el Hamiltoniano es independiente del tiempo, una solución de la ecuación diferencial tiene la forma

$$\phi(\vec{r}, t) = e^{-i\frac{tE}{\hbar}} \phi(\vec{r}), \quad (2.12)$$

donde E es un autovalor del operador Hamiltoniano. De la definición de este sigue que $|\phi(\vec{r}, t)|^2 = |\phi(\vec{r})|^2$, lo que implica que la probabilidad de encontrar a la partícula en \vec{r} no cambiará con el tiempo. Así la E no varía con el tiempo. Por esto, los estados de la forma (2.12) son llamados *estados estacionarios*.

Para hallar los estados estacionarios no es necesario resolver la ecuación de Schrödinger, sino la ecuación de autovalores

$$H \phi(\vec{r}) = E \phi(\vec{r}). \quad (2.13)$$

Esta también es llamada *ecuación de Schrödinger independiente del tiempo*.

Hasta ahora se ha definido la función de onda de una partícula y su dinámica, sin embargo no se ha mostrado como es que se pueden obtener de las magnitudes físicas. Un observable es definido como un operador autoadjunto que representa a una magnitud física, como la energía o el momentum. Los posibles resultados que se pueden obtener al medir esta magnitud física son los autovalores del observable¹. En consecuencia, E es la energía de la partícula, pues esta es un autovalor del operador Hamiltoniano.

De forma similar al caso de una partícula, el estado de un sistema de n partículas es una función de onda $\phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)$ que pertenece al estado de Hilbert \mathcal{H}^n dado por

$$\mathcal{H}^n = \left\{ \phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) \mid \int |\phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)|^2 d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_n < \infty \right\} \quad (2.14)$$

¹Que el observable sea autoadjunto garantiza que sus autovalores serán números reales.

Es posible obtener un espacio de Hilbert para n partículas a partir de n espacios de Hilbert de una partícula. Esto usando el producto tensorial. Sea $|\phi_j\rangle$ un estado en el espacio de Hilbert \mathcal{H}_j ². Si se define

$$|\phi_1 \otimes \dots \otimes \phi_n\rangle := |\phi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_n\rangle \quad (2.15)$$

y el producto interno

$$\langle \phi_n \otimes \dots \otimes \phi_n | \psi_1 \otimes \dots \otimes \psi_n \rangle := \langle \phi_1 | \psi_1 \rangle \dots \langle \phi_n | \psi_n \rangle. \quad (2.16)$$

Estos forman un espacio de Hilbert para n partículas. Nótese que no todos los estados de este nuevo espacio de Hilbert tienen la forma $|\phi_1 \otimes \dots \otimes \phi_n\rangle$, en general estos pueden expresados como

$$|\phi\rangle = \sum_{a_1 \dots a_n} c_{a_1 \dots a_n} |\phi_{a_1} \otimes \dots \otimes \phi_{a_n}\rangle \quad (2.17)$$

En el espacio de posiciones este se puede representar como

$$\phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) = \sum_{a_1 \dots a_n} c_{a_1 \dots a_n} \phi_{a_1}(\vec{r}_1) \dots \phi_{a_n}(\vec{r}_n) \quad (2.18)$$

Los observables de un sistema de n partículas se puede construir a partir de los observable para una partícula. Un observable A en un espacio de Hilbert \mathcal{H} define la acción en el espacio de Hilbert $\mathcal{H}^{\otimes n}$.

$$(I \otimes \dots \otimes A \otimes \dots \otimes I) |\phi_1 \otimes \dots \otimes \phi_j \dots \otimes \phi_n\rangle = |\phi_1 \otimes \dots \otimes A\phi_j \otimes \dots \otimes \phi_n\rangle \quad (2.19)$$

Este observable puede ser denotado como

$$A_j = I \otimes \dots \otimes A \otimes \dots \otimes I \quad (2.20)$$

De modo que el observable para el sistema de n partículas es

$$A(n) = \sum_{j=1}^n A_j \quad (2.21)$$

Cuya acción en un estado $|\phi_1 \otimes \dots \otimes \phi_n\rangle$ está dada por

$$A(n) |\phi_1 \otimes \dots \otimes \phi_n\rangle = \sum_{j=1}^n |\phi_1 \otimes \dots \otimes A\phi_j \otimes \dots \otimes \phi_n\rangle \quad (2.22)$$

A diferencia de los sistemas de una sola partícula, en los sistemas de n partículas se tiene que tomar en cuenta que dos partículas que comparten las mismas propiedades intrínsecas, definidas como aquellas que no dependen del estado dinámico de la partícula, son en principio *idénticas*. Clásicamente esto no es muy relevante, pues al poder seguir el movimiento de las partículas estas se pueden distinguir. Sin embargo, en la teoría cuántica esto no es posible, por lo que cuando dos partículas son idénticas también son *indistinguibles*.

Entonces un sistema de n partículas idénticas puede descrito por solo una si las partículas tienen una dinámica similar, como sería en el caso de los electrones en una red cristalina.

²Aquí se usa la notación bra-ket. En esta se tiene $\langle r | \phi \rangle = \phi(\vec{r})$

2.3.2. Aproximación tight-binding

En un átomo aislado los orbitales están localizados alrededor del núcleo de este. Se puede considerar que para formar una red cristalina se acercan los átomos que la formarán, tales que al inicio se encuentran muy alejados unos de otros, para así poder ignorar las interacciones entre estos. Al hacer esto los orbitales de los electrones serán perturbados debido a la interacción con los otros átomos. En la aproximación tight-binding solo se consideran las interacciones con los átomos vecinos, de modo que al ser perturbados los orbitales los electrones pueden pasar de estar ligados a un átomo a estar ligado a uno de sus vecinos, debido a la formación de enlaces electrónicos.

El carbono tiene una estructura electrónica dada por $1s^2 2s^2 2p^2$, de modo que para formar una estructura cristalina hexagonal, se encuentra hibridizado un orbital s con los orbitales p_x y p_y del segundo nivel de energía, formando enlaces tipo σ . Los enlaces σ al ser robustos no contribuyen de a las propiedades electrónicas del grafeno [12], por lo que no se consideran en este desarrollo. Los enlaces p_z son forman enlaces π debido a la interacción electrostática con los otros núcleos de carbono³. Así estos son los usados en la aproximación tight-binding.

El Hamiltoniano para un electrón en el orbital p_z en la aproximación tight-binding está dado por

$$H(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \sum_{\vec{R} \in \mathcal{L}} \left(V(\vec{r} - \vec{r}_1 - \vec{R}) + V(\vec{r} - \vec{r}_2 - \vec{R}) \right), \quad (2.23)$$

donde \vec{r}_1 y \vec{r}_2 son las posiciones de los núcleos de carbono en el interior de la celda unitaria y \mathcal{L} es el conjunto de los vectores posición de cada punto de la estructura cristalina.

2.3.3. Función de onda de Bloch

Si $\phi_1(\vec{r})$ es la función de onda en el espacio de posiciones que corresponde al orbital p_z del átomo de carbono en la posición \vec{r}_1 , se tiene que

$$H\phi_1(\vec{r}) = \epsilon_1 \phi_1(\vec{r}) + \left(\sum_{\vec{R} \neq \vec{0}} \left(V(\vec{r} - \vec{r}_1 - \vec{R}) + V(\vec{r} - \vec{r}_2 - \vec{R}) \right) + V(\vec{r} - \vec{r}_2) \right) \phi_1(\vec{r}), \quad (2.24)$$

donde ϵ_1 puede interpretarse como la energía al caso donde solo estuviera el átomo de carbono en la posición \vec{r}_1 .

De igual se puede definir $\phi_2(\vec{r})$ como la función de onda correspondiente al orbital p_z del átomo de carbono en la posición \vec{r}_2 .

$$H\phi_2(\vec{r}) = \epsilon_2 \phi_2(\vec{r}) + \left(\sum_{\vec{R} \neq \vec{0}} \left(V(\vec{r} - \vec{r}_1 - \vec{R}) + V(\vec{r} - \vec{r}_2 - \vec{R}) \right) + V(\vec{r} - \vec{r}_1) \right) \phi_2(\vec{r}), \quad (2.25)$$

Debido a la simetría de la estructura cristalina se debe cumplir que $\epsilon_1 = \epsilon_2$ y que las otras sumatorias de potenciales son iguales, de modo que se puede definir $\epsilon = \epsilon_1, \epsilon_2$ y el operador \hat{U} que corresponde a las interacciones con los iones de los demás átomos de carbono. Así

$$H |\phi_j\rangle = \epsilon |\phi_j\rangle + \hat{U} |\phi_j\rangle, \quad (2.26)$$

³No se consideran las interacciones entre los electrones en los orbitales p_z

donde $j \in \{1, 2\}$.

Del teorema de Bloch (ver Apéndice A) se tiene que la función de onda de Bloch es un autovalor del Hamiltoniano, pero para el caso del grafeno hay dos sub-redes triangulares. Por lo que las funciones de onda de Bloch correspondientes a estas sub-redes son de la forma

$$\psi_{\vec{k},j}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R} \in \mathcal{L}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \phi_j(\vec{r} - \vec{R}), \quad (2.27)$$

donde N es el número de elementos de cada sub-red triangular del grafeno y $j \in \{1, 2\}$, el cual indica a qué sub-red corresponde.

De modo que la función de onda de Bloch del sistema al ser una combinación lineal de las funciones de onda de Bloch de cada sub-red, se puede expresar como

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R} \in \mathcal{L}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \left[\beta_1 \phi_1(\vec{r} - \vec{R}) + \beta_2 \phi_2(\vec{r} - \vec{R}) \right]. \quad (2.28)$$

Ya que los orbitales p_z están fuertemente localizados, se puede considerar que $\int \phi_1(\vec{r})^* \phi_2(\vec{r}) d\vec{r} = 0$, de modo que los orbitales forman una base ortonormal.

Si se define

$$\phi(\vec{r}) = \beta_1 \phi_1(\vec{r}) + \beta_2 \phi_2(\vec{r}), \quad (2.29)$$

la cual está normalizada, es decir

$$\int \phi^*(\vec{r} - \vec{R}) \phi(\vec{r} - \vec{R}') d^2r = \delta_{\vec{R}, \vec{R}'}, \quad (2.30)$$

se puede interpretar como la función de onda correspondiente a una celda de Wigner-Seitz.

Para verificar que esta definición mantiene la condición de normalización de la función de onda de Bloch, se expresa $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ en función de $\phi(\vec{r})$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R} \in \mathcal{L}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \phi(\vec{r} - \vec{R}). \quad (2.31)$$

Entonces

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\vec{k}} | \psi_{\vec{k}} \rangle &= \int \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) d^2r \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{R} \in \mathcal{L}} \sum_{\vec{R}' \in \mathcal{L}} \int e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} \phi^*(\vec{r} - \vec{R}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}'} \phi(\vec{r} - \vec{R}') d^2r \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{R} \in \mathcal{L}} \sum_{\vec{R}' \in \mathcal{L}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}' - \vec{R})} \int \phi^*(\vec{r} - \vec{R}) \phi(\vec{r} - \vec{R}') d^2r \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{R} \in \mathcal{L}} \sum_{\vec{R}' \in \mathcal{L}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}' - \vec{R})} \delta_{\vec{R}, \vec{R}'} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{R} \in \mathcal{L}} 1 \\ &= 1, \end{aligned}$$

Así se verifica que $\psi_{\vec{k}}$ está normalizada. Además al ser un autovector del Hamiltoniano tiene un autovalor correspondiente, denotado por $E(\vec{k})$, el cual satisface

$$H\psi_{\vec{k}} = E(\vec{k})\psi_{\vec{k}}. \quad (2.32)$$

Además $E(\vec{k})$ no varía con el tiempo, ya que la función de onda de Bloch es un estado estacionario.

Hallando $\langle \phi_n | H | \psi_{\vec{k}} \rangle$, tal que $n \in \{1, 2\}$, se obtiene

$$E(\vec{k}) \langle \phi_n | \psi_{\vec{k}} \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R} \in L} \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \sum_{j=1}^2 (\beta_j \langle \phi_n | H | \phi_j \rangle) \right) \quad (2.33)$$

Al usar (2.26) se obtiene

$$E(\vec{k}) \langle \phi_n | \psi_{\vec{k}} \rangle = \epsilon \langle \phi_n | \psi_{\vec{k}} \rangle + \langle \phi_n | \hat{U} | \psi_{\vec{k}} \rangle \quad (2.34)$$

Luego hallando el valor de $\langle \phi_1 | \psi_{\vec{k}} \rangle$

$$\begin{aligned} \langle \phi_1 | \psi_{\vec{k}} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R} \in L} \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \sum_{j=1}^2 (\beta_j \langle \phi_1 | \phi_j \rangle) \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\beta_1 \int \phi_1^*(\vec{r}) \phi_1(\vec{r}) d^2r + \beta_2 \int \phi_1^*(\vec{r}) \phi_2(\vec{r}) d^2r \right. \\ &\quad + \beta_2 e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} \int \phi_1^*(\vec{r}) \phi_2(\vec{r} + \vec{a}_1) d^2r + \beta_2 e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \int \phi_1^*(\vec{r}) \phi_2(\vec{r} + \vec{a}_2) d^2r \\ &\quad \left. + \dots \right) \end{aligned} \quad (2.35)$$

Solo la integral $\int \phi_1^*(\vec{r}) \phi_1(\vec{r}) d^2r$ es diferente de cero, esto es debido a que las funciones de onda están fuertemente localizadas. De igual forma se obtiene para $|\phi_2\rangle$, de modo que

$$\langle \phi_1 | \psi_{\vec{k}} \rangle = \frac{\beta_1}{\sqrt{N}} \quad \text{y} \quad \langle \phi_2 | \psi_{\vec{k}} \rangle = \frac{\beta_2}{\sqrt{N}}. \quad (2.36)$$

Hallando $\langle \phi_1 | \hat{U} | \psi_{\vec{k}} \rangle$

$$\begin{aligned} \langle \phi_1 | \hat{U} | \psi_{\vec{k}} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R} \in L} \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \sum_{j=1}^2 (\beta_j \langle \phi_1 | \hat{U} | \phi_j \rangle) \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\beta_1 \int \phi_1^*(\vec{r}) U(\vec{r}) \phi_1(\vec{r}) d^2r + \beta_2 \int \phi_1^*(\vec{r}) U(\vec{r}) \phi_2(\vec{r}) d^2r \right. \\ &\quad + \beta_2 e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} \int \phi_1^*(\vec{r}) U(\vec{r}) \phi_2(\vec{r} + \vec{a}_1) d^2r \\ &\quad \left. + \beta_2 e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \int \phi_1^*(\vec{r}) U(\vec{r}) \phi_2(\vec{r} + \vec{a}_2) d^2r + \dots \right) \end{aligned} \quad (2.37)$$

Solo la integral $\int \phi_1^*(\vec{r}) U(\vec{r}) \phi_2(\vec{r}) d^2r$ es diferente de cero, pues debido a que la función de onda está fuertemente localizada, es decir $\phi_1(\vec{r}) \ll 1$ cuando $\vec{r} \neq 0$, y que la interacción con los demás

iones de carbono se tiene $U(\vec{r}) \ll 1$ cuando $\vec{r} = 0$, la integral $\int \phi_1^*(\vec{r})U(\vec{r})\phi_1(\vec{r})d^2r$ se puede asumir que es igual cero. Por los mismos argumentos las demás integrales se asumen que son iguales a cero, entonces

$$\langle \phi_1 | \hat{U} | \psi_{\vec{k}} \rangle = \frac{\beta_2}{\sqrt{N}} \left(\int \phi_1^*(\vec{r})U(\vec{r})\phi_2(\vec{r})d^2r \right) \left(1 + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right). \quad (2.38)$$

De igual forma se obtiene que

$$\langle \phi_2 | \hat{U} | \psi_{\vec{k}} \rangle = \frac{\beta_1}{\sqrt{N}} \left(\int \phi_2^*(\vec{r})U(\vec{r})\phi_1(\vec{r})d^2r \right) \left(1 + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right). \quad (2.39)$$

Al definir

$$\hbar t = - \int \phi_1^*(\vec{r})U(\vec{r})\phi_2(\vec{r})d^2r, \quad (2.40)$$

las ecuaciones obtenidas de (2.34) se pueden expresar como

$$\frac{\beta_1}{\sqrt{N}}(E(\vec{k}) - \epsilon) = \frac{-\beta_2 \hbar t}{\sqrt{N}} \left(1 + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right) \quad (2.41)$$

$$\frac{\beta_2}{\sqrt{N}}(E(\vec{k}) - \epsilon) = \frac{-\beta_1 \hbar t^*}{\sqrt{N}} \left(1 + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right) \quad (2.42)$$

En forma matricial esto es

$$\begin{pmatrix} \tilde{E} & \hbar t f(\vec{k}) \\ \hbar t^* f^*(\vec{k}) & \tilde{E} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.43)$$

donde

$$f(\vec{k}) = 1 + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \quad \text{y} \quad \tilde{E} = E(\vec{k}) - \epsilon. \quad (2.44)$$

Ya que β_1 y β_2 no pueden ser cero el determinante de la matriz debe ser cero. Por lo que

$$\tilde{E}^2(\vec{k}) = \hbar^2 |t|^2 |f(\vec{k})|^2 \quad (2.45)$$

De la ecuación (2.43) se obtiene

$$\beta_2 = \frac{-t\hbar}{\tilde{E}} f(\vec{k}) \beta_1 \quad (2.46)$$

Reemplazando en (2.29)

$$\phi(\vec{r}) = \beta_1 \phi_1(\vec{r}) - \frac{t\hbar}{\tilde{E}} f(\vec{k}) \beta_1 \phi_2(\vec{r}) \quad (2.47)$$

Ya que está normalizada

$$\begin{aligned} 1 &= |\beta_1|^2 + |\beta_1|^2 \left(\frac{\hbar |t|}{\tilde{E}} \right)^2 |f(\vec{k})|^2 + |\beta_1|^2 \left(\frac{t\hbar}{\tilde{E}} \right) f(\vec{k}) \int \phi_1^*(\vec{r})\phi_2(\vec{r})d^2r \\ &\quad + |\beta_1|^2 \left(\frac{t^*\hbar}{\tilde{E}} \right) f^*(\vec{k}) \int \phi_2^*(\vec{r})\phi_1(\vec{r})d^2r \\ &= |\beta_1| \left[1 + \frac{\hbar^2 |t|^2}{\tilde{E}^2} |f(\vec{k})|^2 \right] \\ &= 2|\beta_1|^2 \end{aligned} \quad (2.48)$$

Se puede asumir que $\beta_1 \in \mathbb{R}$ ya que está si fuera un número complejo solo agregaría un factor de fase a (2.29). Entonces se puede hallar el valor de $\phi(\vec{r})$ para los dos casos obtenidos de (2.45):

- Para $\tilde{E} = \hbar |tf(\vec{k})|$

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_1(\vec{r}) - \frac{t}{|t|} \frac{1 + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_2}}{\sqrt{3 + 2 \cos(\vec{k} \cdot \vec{a}_1) + 2 \cos(\vec{k} \cdot \vec{a}_2) + 2 \cos(\vec{k} \cdot (\vec{a}_1 - \vec{a}_2))}} \phi_2(\vec{r}) \right) \quad (2.49)$$

- Para $\tilde{E} = -\hbar |tf(\vec{k})|$

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_1(\vec{r}) + \frac{t}{|t|} \frac{1 + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_2}}{\sqrt{3 + 2 \cos(\vec{k} \cdot \vec{a}_1) + 2 \cos(\vec{k} \cdot \vec{a}_2) + 2 \cos(\vec{k} \cdot (\vec{a}_1 - \vec{a}_2))}} \phi_2(\vec{r}) \right) \quad (2.50)$$

Se puede asumir que $t \in \mathbb{R}$, ya que si se eligen las funciones de onda $\tilde{\phi}_1(\vec{r}) = e^{\frac{-i \arg(t)}{2}} \phi_1(\vec{r})$ y $\tilde{\phi}_2(\vec{r}) = e^{\frac{i \arg(t)}{2}} \phi_2(\vec{r})$, la función de onda de Bloch sería $\frac{e^{\frac{i \arg(t)}{2}}}{\sqrt{2}} \left(\tilde{\phi}_1(\vec{r}) \mp \frac{f(\vec{k})}{|f(\vec{k})|} \tilde{\phi}_2(\vec{r}) \right)$. Esta solo difiere en un facto de fase de la función de onda si t fuera real.

Entonces la función de onda de Bloch es

$$\psi(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{\vec{R} \in \mathcal{L}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \left(\phi_1(\vec{r}) \mp \frac{1 + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_2}}{\sqrt{3 + 2 \cos(\vec{k} \cdot \vec{a}_1) + 2 \cos(\vec{k} \cdot \vec{a}_2) + 2 \cos(\vec{k} \cdot (\vec{a}_1 - \vec{a}_2))}} \phi_2(\vec{r}) \right), \quad (2.51)$$

para $\tilde{E} = \pm \hbar t |f(\vec{k})|$

2.4. Bandas de energía

2.4.1. Espectro de energía

Ya que ϵ es solo un constante en (2.45) se puede asumir que esta es igual a cero, de modo que la energía viene dada por

$$\begin{aligned} E(\vec{k}) &= \pm \hbar t |f(\vec{k})| = \pm \hbar t \sqrt{\left(1 + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_2}\right) \left(1 + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2}\right)} \\ &= \pm \hbar t \sqrt{3 + 2 \cos(\vec{k} \cdot \vec{a}_1) + 2 \cos(\vec{k} \cdot \vec{a}_2) + 2 \cos(\vec{k} \cdot (\vec{a}_1 - \vec{a}_2))} \end{aligned} \quad (2.52)$$

En la Figura 2.4a se muestran las gráficas de los dos valores de $E(\vec{k})$, y se observa que las bandas de energía se intersectan en determinados valores de \vec{k} , los cuales son conocidos como los *puntos de Dirac* (ver Fig. 2.4b).

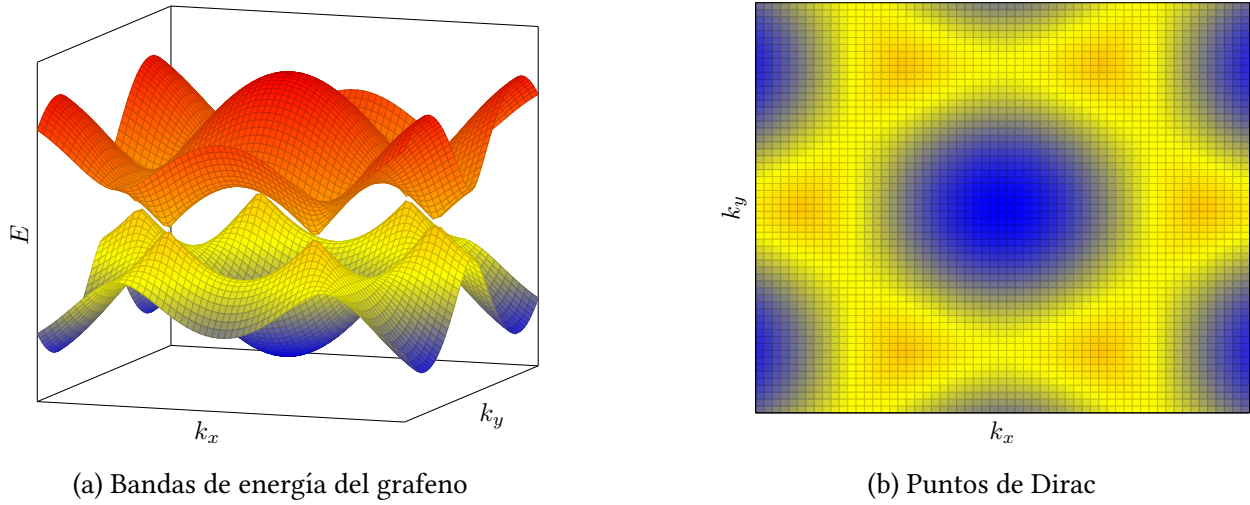


Figura 2.4: Bandas de energía del grafeno y espectro de energía alrededor de los primeros puntos de Dirac

Para hallar los valores de los puntos de Dirac se expresa $E(\vec{k})$ en función de \vec{a}_1 y \vec{a}_2 .

$$\begin{aligned}
 E(\vec{k}) &= \pm \hbar t \sqrt{3 + 2 \cos \left(\frac{a\sqrt{3}k_x}{2} + \frac{3ak_y}{2} \right) + 2 \cos \left(-\frac{a\sqrt{3}k_x}{2} + \frac{3ak_y}{2} \right) + 2 \cos \left(a\sqrt{3}k_x \right)} \\
 &= \pm \hbar t \sqrt{3 + 4 \cos \left(\frac{3ak_y}{2} \right) \cos \left(\frac{a\sqrt{3}k_x}{2} \right) + 2 \left[2 \cos^2 \left(\frac{a\sqrt{3}k_x}{2} \right) - 1 \right]} \\
 &= \pm \hbar t \sqrt{1 + 4 \cos \left(\frac{3ak_y}{2} \right) \cos \left(\frac{a\sqrt{3}k_x}{2} \right) + 4 \cos^2 \left(\frac{a\sqrt{3}k_x}{2} \right)} \quad (2.53)
 \end{aligned}$$

Al completar cuadrados se nota que $E(\vec{k})$ es cero cuando

$$\left(2 \cos \left(\frac{a\sqrt{3}k_x}{2} \right) + \cos \left(\frac{3ak_y}{2} \right) \right)^2 + \sin^2 \left(\frac{3ak_y}{2} \right) = 0 \quad (2.54)$$

Entonces

$$k_y = \frac{2n\pi}{3a} \quad \text{y} \quad \cos \left(\frac{a\sqrt{3}k_x}{2} \right) = \frac{(-1)^{n+1}}{2} \quad (2.55)$$

donde $n \in \mathbb{Z}$.

Si n es par se tiene que $k_x = \frac{4m\pi}{a\sqrt{3}} \pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}$, para $m \in \mathbb{Z}$. Entonces al expresarlo en función de los valores de \vec{a}_1^* y \vec{a}_2^* definidos en (2.3) se obtiene

$$\vec{k} = \left(\frac{4m\pi}{a\sqrt{3}} \pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \right) \hat{x} + \frac{2n\pi}{3a} \hat{y} = \left\{ \begin{aligned} &(\vec{a}_1^* - \vec{a}_2^*)m + (\vec{a}_1^* + \vec{a}_2^*)\frac{n}{2} - \vec{a}_2^* - \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \hat{x} + \frac{2\pi}{3a} \hat{y} \\ &(\vec{a}_1^* - \vec{a}_2^*)m + (\vec{a}_1^* + \vec{a}_2^*)\frac{n}{2} - \vec{a}_1^* + \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \hat{x} + \frac{2\pi}{3a} \hat{y} \end{aligned} \right. \quad (2.56)$$

De igual forma se obtiene para n impar que $k_x = \frac{4m\pi}{a\sqrt{3}} \pm \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}$ y

$$\vec{k} = \left(\frac{4m\pi}{a\sqrt{3}} \pm \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right) \hat{x} + \frac{2n\pi}{3a} \hat{y} = \begin{cases} (\vec{a}_1^* - \vec{a}_2^*)m + (\vec{a}_1^* + \vec{a}_2^*)\frac{(n-1)}{2} - \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\hat{x} + \frac{2\pi}{3a}\hat{y} \\ (\vec{a}_1^* - \vec{a}_2^*)m + (\vec{a}_1^* + \vec{a}_2^*)\frac{(n-1)}{2} + \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\hat{x} + \frac{2\pi}{3a}\hat{y} \end{cases} \quad (2.57)$$

Se puede observar que las soluciones son los vértices de la red recíproca del grafeno, ya que estos se pueden expresar como

$$\vec{k} = m'\vec{a}_1^* + n'\vec{a}_2^* \pm \frac{2\pi}{3\sqrt{3}}\hat{x} + \frac{2\pi}{3a}\hat{y} \quad (2.58)$$

donde m y n son números enteros.

Así se definen los conjuntos de puntos de Dirac dados por

$$[\vec{K}^+] = \left\{ \vec{K}_{mn}^+ \mid \vec{K}_{mn}^+ = m\vec{a}_1^* + n\vec{a}_2^* + \frac{2\pi}{3\sqrt{3}}\hat{x} + \frac{2\pi}{3a}\hat{y}, \text{ donde } m, n \in \mathbb{Z} \right\} \quad (2.59)$$

$$[\vec{K}^-] = \left\{ \vec{K}_{mn}^- \mid \vec{K}_{mn}^- = m\vec{a}_1^* + n\vec{a}_2^* - \frac{2\pi}{3\sqrt{3}}\hat{x} + \frac{2\pi}{3a}\hat{y}, \text{ donde } m, n \in \mathbb{Z} \right\} \quad (2.60)$$

Estos forman las dos sub-redes triangulares de la red recíproca.

2.4.2. Espectro de energía alrededor de los puntos de Dirac

Para hallar de manera aproximada el valor de la energía alrededor de los puntos de Dirac se define $\vec{\kappa} = \vec{k} - \vec{K}_{mn}^\pm$, tal que $\|\vec{\kappa}\| \ll 1$, y se realiza la expansión de Taylor de $f(\vec{k})$ alrededor del punto \vec{K}_{mn}^\pm .

$$\begin{aligned} f(\vec{k}) &= 1 + e^{-i\vec{K}_{mn}^\pm \cdot \vec{a}_1} e^{-i\vec{\kappa} \cdot \vec{a}_1} + e^{-i\vec{K}_{mn}^\pm \cdot \vec{a}_2} e^{-i\vec{\kappa} \cdot \vec{a}_2} \\ &= 1 + e^{-i\vec{K}_{mn}^\pm \cdot \vec{a}_1} \left(1 - i\vec{\kappa} \cdot \vec{a}_1 - \frac{(\vec{\kappa} \cdot \vec{a}_1)^2}{2} + \dots \right) + e^{-i\vec{K}_{mn}^\pm \cdot \vec{a}_2} \left(1 - i\vec{\kappa} \cdot \vec{a}_2 - \frac{(\vec{\kappa} \cdot \vec{a}_2)^2}{2} + \dots \right) \\ &\approx 1 + e^{-i\vec{K}_{mn}^\pm \cdot \vec{a}_1} + e^{-i\vec{K}_{mn}^\pm \cdot \vec{a}_2} - i\vec{\kappa} \cdot \vec{a}_1 e^{-i\vec{K}_{mn}^\pm \cdot \vec{a}_1} - i\vec{\kappa} \cdot \vec{a}_2 e^{-i\vec{K}_{mn}^\pm \cdot \vec{a}_2} \end{aligned} \quad (2.61)$$

Ya que la energía en los puntos de Dirac es cero, es decir $|f(\vec{K}_{mn}^\pm)| = 0$, se obtiene

$$f(\vec{k}) \approx -i(\vec{\kappa} \cdot \vec{a}_1) e^{-i\vec{K}_{mn}^\pm \cdot \vec{a}_1} - i(\vec{\kappa} \cdot \vec{a}_2) e^{-i\vec{K}_{mn}^\pm \cdot \vec{a}_2} \quad (2.62)$$

Para \vec{K}_{mn}^+

$$\begin{aligned} f(\vec{k}) &= -i \left(\frac{a\sqrt{3}}{2} \kappa_1 + \frac{3a}{2} \kappa_2 \right) e^{-i4\pi/3 - i2\pi m} - i \left(-\frac{a\sqrt{3}}{2} \kappa_1 + \frac{3a}{2} \kappa_2 \right) e^{-i2\pi/3 - i2\pi n} \\ &= -i \left(\frac{a\sqrt{3}}{2} \kappa_1 + \frac{3a}{2} \kappa_2 \right) \left(-\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2} \right) - i \left(-\frac{a\sqrt{3}}{2} \kappa_1 + \frac{3a}{2} \kappa_2 \right) \left(-\frac{1}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \\ &= \frac{3a}{2} (\kappa_1 + i\kappa_2) \end{aligned} \quad (2.63)$$

Para \vec{K}_{mn}^-

$$\begin{aligned}
 f(\vec{k}) &= -i \left(\frac{a\sqrt{3}}{2} \kappa_1 + \frac{3a}{2} \kappa_2 \right) e^{-i2\pi/3 - i2\pi m} - i \left(-\frac{a\sqrt{3}}{2} \kappa_1 + \frac{3a}{2} \kappa_2 \right) e^{-i4\pi/3 - i2\pi n} \\
 &= -i \left(\frac{a\sqrt{3}}{2} \kappa_1 + \frac{3a}{2} \kappa_2 \right) \left(-\frac{1}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2} \right) - i \left(-\frac{a\sqrt{3}}{2} \kappa_1 + \frac{3a}{2} \kappa_2 \right) \left(-\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \\
 &= \frac{3a}{2} (-\kappa_1 + i\kappa_2)
 \end{aligned} \tag{2.64}$$

Reemplazando en (2.52) se obtiene

$$E(\vec{k}) = \pm \frac{3\hbar v_F}{2} \sqrt{\kappa_1^2 + \kappa_2^2}, \tag{2.65}$$

por lo que los valores de la energía alrededor de los puntos de Dirac es independiente del conjunto de puntos Dirac que se elija. Además la forma del espectro energía alrededor de los puntos de Dirac toma la forma de un cono, lo cual es consistente con el hecho de que sean llamados como *conos de Dirac*.

Capítulo 3

Campo de Dirac en el grafeno

En el capítulo 2 se obtuvo el espectro de energía alrededor de los puntos de Dirac, y este era igual para los conjuntos de puntos $[\vec{K}^+]$ y $[\vec{K}^-]$. En este capítulo se observará que el Hamiltoniano alrededor de los puntos de Dirac depende del conjunto de puntos al que pertenezca el punto de Dirac sobre el que se analiza. Además, los Hamiltonianos corresponden al Hamiltoniano de la ecuación de Dirac en 2+1 dimensiones para dos representaciones inequivalentes de las matrices de Dirac.

3.1. Identificación del campo de Dirac

3.1.1. Hamiltoniano y matrices de Dirac

Para hallar el Hamiltoniano en la base $\{\phi_1, \phi_2\}$ se usa (2.43), asumiendo que $t \in \mathbb{R}$. Así se obtiene

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} 0 & -t\hbar f(\vec{k}) \\ -t\hbar f^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

Luego, usando (2.63) y (2.64), se obtiene que el Hamiltoniano alrededor de \vec{K}_{mn}^+

$$\mathcal{H}^+ = \begin{pmatrix} 0 & \frac{-3at\hbar}{2}(\kappa_1 + i\kappa_2) \\ \frac{-3at\hbar}{2}(\kappa_1 - i\kappa_2) & 0 \end{pmatrix} = \frac{3at}{2} (-\hbar\kappa_1\sigma_1 + \hbar\kappa_2\sigma_2) \quad (3.2)$$

y el Hamiltoniano alrededor de \vec{K}_{mn}^-

$$\mathcal{H}^- = \begin{pmatrix} 0 & \frac{-3at\hbar}{2}(-\kappa_1 + i\kappa_2) \\ \frac{-3at\hbar}{2}(-\kappa_1 - i\kappa_2) & 0 \end{pmatrix} = \frac{3at}{2} (\hbar\kappa_1\sigma_1 + \hbar\kappa_2\sigma_2) \quad (3.3)$$

Se observa que los Hamiltonianos correspondientes a dos elementos de (2.59) son iguales, también para los elementos de (2.60). Por lo que estos forman dos clases de equivalencia, es decir que hay dos clases de puntos de Dirac inequivalentes frente a traslaciones en los vectores primitivos de la red recíproca. Esto es consistente con el hecho de que al ser la red recíproca del grafeno de forma hexagonal, por ende con una celda de Wigner-Seitz de dos elementos, los elementos de la red recíproca se clasifican en dos clases como en el caso de la red cristalina.

Se sabe que las matrices de Dirac cumplen el álgebra

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2I g^{\mu\nu} \quad (3.4)$$

Para el caso en $2 + 1$ dimensiones, es decir que g tiene una signatura $(+, -, -)$, existen dos representaciones que satisfacen esta relación:

$$\begin{aligned} \gamma^0 &= \sigma_3 & \gamma^1 &= -i\sigma_2 & \gamma^2 &= -i\sigma_1 \\ \gamma^0 &= \sigma_3 & \gamma^1 &= i\sigma_2 & \gamma^2 &= -i\sigma_1 \end{aligned} \quad (3.5)$$

Estas son representaciones inequivalentes ya que si fueran equivalentes debería existir una matriz S tal que

$$S^{-1}\sigma_3 S = \sigma_3 \quad S^{-1}(i\sigma_2)S = -i\sigma_2 \quad S^{-1}(-i\sigma_1)S = -i\sigma_1 \quad (3.6)$$

Al multiplicar estas se obtiene que $S^{-1}\sigma_3\sigma_2\sigma_1 S = -\sigma_3\sigma_2\sigma_1$, pero las matrices de Pauli cumplen que $\sigma_3\sigma_2\sigma_1 = -I$, por lo que $S^{-1}S = -I$. Esto implica que $I = 0$, lo cual es un absurdo. Así estas representaciones son inequivalentes.

Además, al ser matrices de 2×2 si estas fueran reducibles debería existir una base que las diagonalizara pero las matrices de Pauli siguen la relación $[\sigma_j, \sigma_k] = 2i\epsilon_{jkl}\sigma_l$, es decir que no conmutan entre sí, por ende estas representaciones son irreducibles.

Los Hamiltonianos de (3.2) y (3.3) se pueden expresar como

$$\mathcal{H}^+ = \frac{3at}{2}(-i\hbar\kappa_1\sigma_3\sigma_2 - i\hbar\kappa_2\sigma_3\sigma_1) \quad \mathcal{H}^- = \frac{3at}{2}(i\hbar\kappa_1\sigma_3\sigma_2 - i\hbar\kappa_2\sigma_3\sigma_1) \quad (3.7)$$

Entonces estas se pueden expresar como

$$\mathcal{H}^\pm = \frac{3at}{2}(\hbar\kappa_1\gamma^0\gamma^1 + \hbar\kappa_2\gamma^0\gamma^2) \quad (3.8)$$

para representaciones distintas de las matrices de Dirac. Por lo que si se quiere obtener un Hamiltoniano que considere ambas clases de equivalencia se puede elegir una representación reducible que contenga a las representaciones en (3.5). Así el Hamiltoniano tiene la forma

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}^+ & 0 \\ 0 & \mathcal{H}^- \end{pmatrix} = \frac{3at}{2}\gamma^0(\hbar\kappa_1\gamma^1 + \hbar\kappa_2\gamma^2)$$

donde la representación reducible de matriz de Dirac está dada por

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} -i\sigma_2 & 0 \\ 0 & i\sigma_2 \end{pmatrix} \quad \gamma^2 = \begin{pmatrix} -i\sigma_1 & 0 \\ 0 & -i\sigma_1 \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

3.1.2. Campo de Dirac

La ecuación de Dirac para una partícula con espín $1/2$ es

$$(i\hbar\gamma^0\partial_0 - i\hbar c\gamma^i\partial_i - mc^2)\psi = 0 \quad (3.10)$$

Usando las dos representaciones irreducibles de la matriz de Dirac dadas en (3.5) para el caso donde las partículas no tienen masa se tienen dos ecuaciones de Dirac

$$i\hbar c\left(\frac{1}{c}\sigma_3\partial_0 - i\sigma_2\partial_1 + i\sigma_1\partial_2\right)\psi(t, x^1, x^2) = 0 \quad (3.11)$$

$$i\hbar c\left(\frac{1}{c}\sigma_3\partial_0 + i\sigma_2\partial_1 + i\sigma_1\partial_2\right)\tilde{\psi}(t, x^1, x^2) = 0 \quad (3.12)$$

Al multiplicar por la matriz σ_3 por la izquierda se obtienen

$$i\hbar c\left(\frac{1}{c}I\partial_0 - \sigma_1\partial_1 - \sigma_2\partial_2\right)\psi(t, x^1, x^2) = 0 \quad (3.13)$$

$$i\hbar c\left(\frac{1}{c}I\partial_0 + \sigma_1\partial_1 - \sigma_2\partial_2\right)\tilde{\psi}(t, x^1, x^2) = 0 \quad (3.14)$$

Entonces

$$c(\sigma_1 i\hbar\partial_1 + \sigma_2 i\hbar\partial_2)\psi(t, x^1, x^2) = i\hbar \frac{\partial\psi(t, x_1, x_2)}{\partial t} \quad (3.15)$$

$$c(-\sigma_1 i\hbar\partial_1 + \sigma_2 i\hbar\partial_2)\tilde{\psi}(t, x^1, x^2) = i\hbar \frac{\partial\tilde{\psi}(t, x_1, x_2)}{\partial t}. \quad (3.16)$$

Así los Hamiltonianos alrededor de los puntos de Dirac, dados por (3.2) y (3.3), son los Hamiltonianos de la ecuación de Dirac en 2+1 dimensiones al reemplazar $i\hbar\partial_1 \mapsto \hbar\kappa_1$ y $i\hbar\partial_2 \mapsto \hbar\kappa_2$ para una rapidez distinta a c , dada por $v_F = \frac{3at}{2}$ y llamada *rapidez de fermi*. De modo que los electrones en los orbitales p_z del grafeno se comportan como fermiones sin masa que se pueden mover a una velocidad límite dada por la v_f en el espacio de 2+1 dimensiones.

Al realizar la transformación por paridad, definida como el cambio $(x^1, x^2) \mapsto (-x^1, x^2)$, se obtiene

$$\hbar c(-i\sigma_1\hbar\partial_1 + i\sigma_2\hbar\partial_2)\psi(t, -x^1, x^2) = i\hbar \frac{\partial\psi(t, -x_1, x_2)}{\partial t} \quad (3.17)$$

$$\hbar c(i\sigma_1\hbar\partial_1 + i\sigma_2\hbar\partial_2)\tilde{\psi}(t, -x^1, x^2) = i\hbar \frac{\partial\tilde{\psi}(t, -x_1, x_2)}{\partial t} \quad (3.18)$$

De modo que los roles de ψ y $\tilde{\psi}$ se intercambian. Así la representación reducible en (3.9) es invariante si se intercambian los roles de las funciones de onda asociadas a cada clase de equivalencia.

3.2. Transformaciones del campo de Dirac

3.2.1. Transformaciones de Lorentz

En un espacio de $2 + 1$ dimensiones se tiene la transformación

$$x^\mu \mapsto x'^\rho = \Lambda_\mu^\rho x^\mu \quad (3.19)$$

Para mantener la norma invariante frente a estas transformaciones de coordenadas se requiere que

$$\begin{aligned} x^\mu g_{\mu\nu} x^\nu &= x'^\rho g_{\rho\sigma} x'^\sigma = \Lambda_\mu^\rho x^\mu g_{\rho\sigma} \Lambda_\nu^\sigma x^\nu \\ g_{\mu\nu} &= \Lambda_\mu^\rho g_{\rho\sigma} \Lambda_\nu^\sigma \end{aligned} \quad (3.20)$$

Esto es

$$\Lambda^T g \Lambda = g \quad (3.21)$$

Así el grupo de Lorentz $O(1, 2)$ al ser el grupo de transformaciones que preservan la forma se puede definir como

$$O(1, 2) = \{ \Lambda \in \mathcal{M}_{3 \times 3} \mid \Lambda^T g \Lambda = g \} \quad (3.22)$$

Se sabe que la determinante de una matriz satisface $\det(AB) = \det(A)\det(B)$ y $\det(A) = \det(A^T)$, entonces si $\Lambda \in O(1, 2)$ se tiene que

$$\begin{aligned} \det(\Lambda^T) \det(g) \det(\Lambda) &= \det(g) \\ \det(\Lambda) \det(g) \det(\Lambda) &= \det(g) \\ \det(\Lambda)^2 &= 1 \\ \det(\Lambda) &= \pm 1. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Así el subconjunto de $O(1, 2)$ formado por los elementos cuya determinante es 1 se denota por $SO(1, 2)$, y es llamado el *grupo especial de Lorentz*. Para probar que $SO(1, 2)$ es un grupo notamos que uno de sus elementos es la matriz identidad y que para $\Lambda, \Lambda' \in SO(1, 2)$ se cumple que

$$\det(\Lambda \Lambda') = \det(\Lambda) \det(\Lambda') = 1, \quad (3.24)$$

entonces $\Lambda \Lambda' \in SO(1, 2)$. Además, de la definición del grupo $O(1, 2)$ se tiene que para todo $\Lambda \in SO(1, 2)$ existe Λ'' tal que $\Lambda \Lambda'' = \Lambda'' \Lambda = I$. De la propiedad de la determinante de un producto se obtiene que $\det(\Lambda'') = 1$, por ende $\Lambda'' \in SO(1, 2)$, es decir que todo elemento $SO(1, 2)$ tiene una inversa.

Si se consideran los elementos de $SO(1, 2)$ tales que Λ_0^0 , estos forman el grupo de Lorentz ortocrono y propio, denotado por $SO^+(1, 2)$

3.2.2. Transformaciones de Lorentz del campo de Dirac

Anteriormente se vieron las transformaciones de Lorentz en el espacio 2+1 dimensiones, sin embargo no se vio como estas transforman al campo de Dirac.

Sea Λ una transformación de Lorentz, esta genera el cambio de coordenadas $x'^\nu = \Lambda^\nu_\mu x^\mu$. Entonces

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x'^\nu} = \Lambda^\nu_\mu \partial'_\nu \quad (3.25)$$

Sea $S(\Lambda)$ un operador tal que

$$\psi'(t', \vec{x}') = S(\Lambda) \psi(t, \vec{x}) \quad (3.26)$$

Entonces

$$\begin{aligned} (i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi(t, x_1, x_2) &= 0 \\ (i\gamma^\mu \Lambda^\nu_\mu \partial'_\nu - m) S^{-1}(\Lambda) \psi'(t', x'_1, x'_2) &= 0 \\ (iS(\Lambda) \gamma^\mu \Lambda^\nu_\mu \partial'_\nu S^{-1}(\Lambda) - m) \psi'(t', x'_1, x'_2) &= 0 \\ (iS(\Lambda) \gamma^\mu \Lambda^\nu_\mu S^{-1}(\Lambda) \partial'_\nu - m) \psi'(t', x'_1, x'_2) &= 0 \end{aligned} \quad (3.27)$$

Al comparar con la ecuación de Dirac en las coordenadas x'_ν

$$(i\gamma^\nu \partial'_\nu - m) \psi'(t', x'_1, x'_2) = 0 \quad (3.28)$$

se obtiene

$$\gamma^\nu = S(\Lambda) \gamma^\mu \Lambda_\mu^\nu S^{-1}(\Lambda) \quad (3.29)$$

Para el caso de la transformación de paridad $(t, x_1, x_2) \mapsto (t, -x_1, x_2)$, la transformación de Lorentz es

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

Entonces a partir de (3.29) se obtienen

$$\begin{aligned} \gamma^0 &= P \gamma^0 P^{-1} \\ \gamma^1 &= -P \gamma^1 P^{-1} \\ \gamma^2 &= P \gamma^2 P^{-1} \end{aligned} \quad (3.31)$$

Al multiplicar usando las cualquiera de las representaciones las matrices de Dirac mostradas en el capítulo anterior, se obtiene que $-PP^{-1} = I$. Entonces el operador paridad P no está asociado a una transformación de Lorentz. De igual forma se obtiene que el operador inversión temporal no está asociado a una transformación de Lorentz.

Capítulo 4

Conclusiones y Perspectivas

Apéndice A

Demostración del teorema de Bloch

Dada una red cristalina con los vectores primitivos $\{\vec{a}_i\}$. Se define el vector traslación \vec{R} como la combinación lineal $\sum_{i \in I} \alpha_i \vec{a}_i$, donde α_i son números enteros, y el conjunto de estos vectores como \mathcal{L} . Se define el operador traslación $T_{\mathbf{R}}$ aplicado en la función f como

$$T_{\mathbf{R}}f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R}) \quad (\text{A.1})$$

Debido a la simetría de traslación de la red cristalina se tiene que el potencial debido a la interacción de la red cristalina con los electrones es invariante frente a traslaciones \vec{R} . Además ya que $\nabla_{\vec{r}+\vec{R}}^2 = \nabla_{\vec{r}}^2$ el Hamiltoniano es invariante frente a traslaciones \vec{R} . De modo que se cumple que

$$\begin{aligned} T_{\mathbf{R}}\mathcal{H}(\vec{r})\psi(\vec{r}) &= T_{\mathbf{R}}[\epsilon(\vec{r})\psi(\vec{r})] = \epsilon(\vec{r} + \vec{R})\psi(\vec{r} + \vec{R}) = \mathcal{H}(\vec{r} + \vec{R})\psi(\vec{r} + \vec{R}) \\ T_{\mathbf{R}}\mathcal{H}(\vec{r})\psi(\vec{r}) &= \mathcal{H}(\vec{r})T_{\mathbf{R}}\psi(\vec{r}) \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Entonces $[T_{\mathbf{R}}, \mathcal{H}] = 0$. Así el Hamiltoniano y el operador traslación $T_{\vec{R}}$ tienen autofunciones y autovalores en común.

Se define $\lambda(\vec{R})$ como un autovalor correspondiente a una de estas autofunciones comunes, es decir $T_{\mathbf{R}}\psi(\vec{r}) = \lambda(\vec{R})\psi(\vec{r})$.

De la definición del operador traslación se tiene que para los vectores $\vec{R}, \vec{P} \in \mathcal{L}$ se cumple que

$$\begin{aligned} T_{\mathbf{R}}T_{\mathbf{P}}\psi(\vec{r}) &= T_{\mathbf{R}+\mathbf{P}}\psi(\vec{r}) \\ \lambda(\vec{R})\lambda(\vec{P}) &= \lambda(\vec{R} + \vec{P}) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Sin embargo (A.3) tiene dos posibles soluciones, $e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}$ y $e^{\vec{k} \cdot \vec{R}}$. Para descartar una de estas se usa la condición de normalización de la función de onda en $T_{\mathbf{R}}\psi(\vec{r}) = \lambda(\vec{R})\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{R})$. De la cual se obtiene la restricción $|\lambda(\vec{R})| = 1$. De este modo la solución es dada por

$$\lambda(\vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \quad (\text{A.4})$$

Por lo que

$$\psi(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}\psi(\vec{r}) \quad (\text{A.5})$$

Las funciones que satisfacen (A.5) son llamadas funciones de onda de Bloch, y son autofunciones del Hamiltoniano \mathcal{H} .

Bibliografía

- [1] Jain, V. K. (2022). Solid State Physics. Springer International Publishing.
- [2] Lomer, W. M. (1955). The valence bands in two-dimensional graphite. Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences, 227(1170), 330–349.
- [3] Bradley, C. J., & Cracknell, A. P. (2009). The Mathematical Theory Of Symmetry In Solids: Representation theory for point groups and space groups. Oxford University Press.
- [4] Seitz, F. (1936). On the Reduction of Space Groups. Annals of Mathematics, 37(1), 17–28.
- [5] Schonenberger, C. (2000). Bandstructure of Graphene and Carbon Nanotubes: An Exercise in Condensed Matter Physics.
- [6] Mervyn, R. (2015). The Tight Binding Method.
- [7] Bruus, H., & Flensberg, K. (2004). Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction. Oxford University Press.
- [8] Fuchs, J.-N., & Goerbig, M. O. (2008). Introduction to the Physical Properties of Graphene.
- [9] Bernevig, B. A., & Hughes, T. L. (2013). Topological Insulators and Topological Superconductors. Princeton University Press.
- [10] Riazuddin. (2012). Dirac equation for quasi-particles in graphene and quantum field theory of their Coulomb interaction. International Journal of Modern Physics B, 26(21), 1242005.
- [11] Sadurní, E., Rivera-Mociños, E., & Rosado, A. (2014). Discrete symmetry in graphene: The Dirac equation and beyond. [Online]. Available: <https://arxiv.org/pdf/1411.6319>
- [12] D. Jena. (2022). Quantum Physics of Semiconductor Materials and Devices. Oxford University Press.
- [13] Hamermesh, M. (1989). Group Theory and Its Application to Physical Problems. Dover Publications.