

José Manuel González Valdés y Alfredo Raya

Instituto de Física y Matemáticas, UMSNH

Resumen

Estudiamos el efecto de un campo magnético uniforme perpendicular a un cristal bidimensional en el espectro de energía de los electrones en la aproximación de amarre fuerte. Para una red cristalina cuadrada, que en ausencia del campo externo es regido por una ecuación cuántica no relativista, notamos que el campo magnético produce el bien conocido espectro de la mariposa de Hofstadter. Cuando el cristal tiene una estructura hexagonal, a bajas energías, la ecuación de movimiento para los portadores de carga es relativista. La correspondiente mariposa generada en presencia del campo magnético se modifica. Sin embargo, el espectro del cuadrado del Hamiltoniano de amarre fuerte para el caso hexagonal nos reproduce dos copias de la mariposa original de Hofstadter con signos cambiados, tal cual se observa en la forma no relativista de la ecuación de Dirac.

Palabras Clave: Grafeno, Mariposa de Hofstadter, ecuación de Dirac.

Abstract

We studied the impact of a uniform magnetic field perpendicular to a bi-dimensional crystal in the energy spectrum for electrons in the tight-binding approximation. For a square lattice, which in absence of external fields is governed by a non-relativistic wave equation, we noticed that the magnetic field produces the well-known spectrum of the Hofstadter butterfly. When the crystal has a hexagonal structure, at low energies the equation of motion for the charge carriers is relativistic. The corresponding butterfly generated in presence of the magnetic field gets modified. However, the spectrum of the squared tight-binding Hamiltonian for the hexagonal lattice reproduces two copies of the original Hofstadter butterfly, with different signs, in analogy to what happens in the non-relativistic form of the Dirac equation.

Ciencia Nicolaita No. 58

Keywords: Graphene, Hofstadter butterfly, Dirac equation.

Introducción

Para los sistemas macroscópicos, las leyes físicas que mejor describen su estado de movimiento, es decir, su evolución temporal, son las de la mecánica clásica. En dos límites extremos estas leyes dejan de ser válidas, en el límite de distancias pequeñas, es decir, para sistemas microscópicos, donde las leyes de Newton deben cambiarse por las leyes de la mecánica cuántica, y en el límite de altas energías, es decir, el de los sistemas relativistas, donde las leyes físicas mantienen su forma de acuerdo a los principios de Teoría de la Relatividad Especial de Einstein. Ambos sistemas están caracterizados

por constantes fundamentales, la constante de Planck h para los sistemas cuánticos y la velocidad de la luz en el vacío, *c*, para los sistemas relativistas o de altas energías (ver, p. ej. [1,2]). La física de partículas elementales se describe en términos de una mecánica

cuántica relativista, llamada teoría cuántica de campos, que se rige tanto por \hbar como por c. Es por esta razón que usualmente se utiliza un conjunto de *unidades naturales* que se

describen fijan do $\hbar = c = 1$.

En la mecánica cuántica ordinaria, la ecuación de movimiento para una partícula de masa m, que se mueve en una dimensión bajo la influencia de un potencial V(x, t), llamada ecuación de Schrödinger

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\psi(x,t),$$

es una ecuación en derivadas parciales, lineal en el tiempo y de segundo orden en las derivadas espaciales. Por esto, es incapaz de describir aspectos relativistas de, por ejemplo, un electrón. La Teoría de la Relatividad Especial de Einstein, requiere que en toda ley física, las coordenadas temporales y espaciales sean tratadas al mismo nivel. Esto implica que para una ecuación de onda relativista, las derivadas temporales y espaciales deben ser del mismo orden. En el caso de una partícula libre, es decir, cuando

V(x, t) = 0, la ecuación de Schrödinger relaciona la energía y el momento de una partícula de la forma

$$E = \frac{p^2}{2m'}$$

llamada relación de dispersión no relativista.

El camino hacia una formulación correcta para la descripción de electrones en un contexto cuántico relativista fue trazado por Paul Adrian Dirac (ver, p. ej. [2]) proponiendo una ecuación --que ahora lleva su nombre-, que es lineal en las coordenadas espaciales y temporales, de acuerdo a los postulados de la relatividad especial, y que a su vez es

Ciencia Nicolaita No. 58

consistente con los postulados de la mecánica cuántica, en particular, con la interpretación estadística de la función de onda. Dicha ecuación tiene carácter matricial, y en forma covariante se escribe

$$(\iota\partial_{\mu}\gamma^{\mu}-m)\psi(x)=0,$$

donde γ^{μ} son las matrices de Dirac, que verifican el álgebra de Clifford { $\gamma^{\mu}, \gamma^{\nu}$ } = $2\eta^{\mu\nu}$ y x representa el cuadrivector de coordenadas del espacio-tiempo. Aquí, $\eta^{\mu\nu}$ es el tensor métrico del espacio de Minkowski. En su representación irreducible, estas matrices tienen dimensión 4 × 4, y una representación explícita para ellas es

$$\gamma^{0} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \qquad \gamma^{i} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^{k} \\ -\sigma^{k} & 0 \end{pmatrix},$$

siendo I la matriz identidad 2×2 y las matrices σ^k , k = 1,2,3 son las matrices de Pauli. Entonces, $\psi(x)$ se representa mediante un vector columna de 4 componentes, llamado espinor, lo que garantiza que $|\psi(x)|^2 \ge 0$, en consistencia con la interpretación probabilística de la ecuación de onda. Más aún, la energía de las partículas descritas por la ecuación de Dirac es de la forma

$$E^2 = \vec{p}^2 + m^2$$
,

que en el límite ultrarelativista, es decir, cuando la masa es despreciable, nos da una relación de lineal entre la energía y el momento de la partícula,

$E = \vec{p}$.

Además, el maridaje entre la mecánica cuántica y la teoría de la relatividad especial nos obliga a que, en aras de salvaguardar el principio de conservación de la energía, debamos aceptar la existencia de antimateria. Es decir, la ecuación de Dirac es una ecuación que describe electrones (materia) y positrones (antimateria), que tienen las mismas propiedades (masa, espín, energía, momento), pero cuya carga eléctrica es de signo opuesto. La ecuación de Dirac libre posee una forma no relativista bien establecida, con dos posibles signos para la energía. Dicha forma se obtiene a través de la transformación de Foldy-Wouthuysen [3,4] y resulta en una ecuación de Schrödinger de la forma

$$1\frac{\partial\psi(\vec{x},t)}{\partial t} = H_{FW}\psi(\vec{x},t),$$

donde H_{FW} es el Hamiltoniano libre en la representación de Foldy-Wouthuysen, que satisface la ecuación estacionaria de Schrödinger

$$H_{FW} \psi(\vec{x}) = \gamma^{\circ} E \psi(\vec{x}).$$

Ciencia Nicolaita No. 58

La forma diagonal de γ^0 nos indica que esta ecuación posee dos valores propios para la energía $E = \sqrt{\vec{p}^2 + m^2}$, que son de igual magnitud pero signo contrario.

Ante el contraste de descripcion es entre sistemas cuánticos relativistas y no relativistas, se antoja imposible tratar de describir un sistema de estado sólido, manipulable en un laboratorio universitario, mediante ecuaciones de onda relativistas. Afortuna damente, en el año 2004 fue descubierto en Manchester, Reino Unido, un material bidimensional, *el grafeno*, que consta de una red de átomos de carbono empacados en un arreglo de tipo panal de abeja de un solo átomo de espesor [5]. Por los experimentos realizados en este material, fueron galardonados con el Premio Nobel de Física 2010 los Dres. Andrei Geim y Konstantin Novoselov.

Es bien sabido que los sólidos, que son sistemas microscópicamente muy complicados de describir, se pueden entender como si estuvieran compuestos de partículas ficticias que interactúan débilmente en el espacio libre, como si el cristal no existiera. Por ejemplo, cuando un electrón se propaga en un semiconductor, su movimiento se perturba de una forma muy complicada debido a sus interacciones con el resto de los electrones y núcleos del material, pero este movimiento se puede describir de manera aproximada como el de un electrón con una masa efectiva (distinta a la masa real del electrón) que se mueve libremente en el espacio. Estos objetos ficticios son llamados *cuasipartículas*, y son útiles para describir propiedades eléctricas, mecánicas y térmicas de los materiales. A bajas energías, las cuasiparticulas portadoras de carga del grafeno, llamadas en ocasiones grafinos [6,7], se comportan como electrones sin masa (o neutrinos con carga) en el sentido de que la relación energía-momento es lineal para estas excitaciones. A diferencia de los electrones ordinarios, los grafinos se mueven a la velocidad de Fermi

 $v_F \approx c_{300}$ [8], de modo que no son genuinamente relativistas, pero si tomamos un nue-

vo sistema de unidades en el que $\hbar = v_F = 1$, entonces podemos describirlos a través de ecuaciones de onda relativistas [9].

Un fenómeno que nos interesa explorar es el impacto de un campo magnético uniforme perpendicular a la membrana del grafeno sobre los valores de la energía de estas cuasipartículas a medida que la intensidad del campo aumenta. Para contrastar, consideramos el llamado problema de Hofstadter [10], en el que se observa que el espectro de energía para un cristal bidimensional de un arreglo cuadrado sujeto a un campo magnético perpendicular al cristal conlleva a un espectro fractal, la llamada Mariposa de Hofstadter. Nos proponemos comparar los espectros resultantes en términos de tomar *"la raíz cuadrada de una mariposa"*. Para ello, argumentamos que los valores de la energía que describen la Mariposa de Hofstadter y que corresponden a los valores propios del Hamiltoniano de amarre fuerte para la red cuadrada son los mismos valores propios del cuadrado del Hamiltoniano de amarre fuerte en la red de grafeno. O sea, la mariposa de la red del grafeno se obtiene "tomando la raíz cuadrada" de la correspon-

diente a la red cuadrada. Este trabajo está organizado de la siguiente manera: En la siguiente sección estudiamos la red cuadrada en ausencia de campos magnéticos y exploramos cómo surge el espectro de Hofstadter. Enseguida exploramos la red hexagonal. Estudiamos su estructura de bandas y la mariposa de Hofstadter para la red hexagonal, llamada mariposa de Hofstadter-Rammal [11] o de Hofstadter-Dirac, nombre que nosotros adoptamos. Para interpretar nuestros resultados, mostramos la equivalencia entre la red cuadrada (monopartita) con la hexagonal (bipartita), para después relacionar los espectros en ambos casos a través de la raíz cuadrada de la mariposa original. Este trabajo está basado en la tesis [12].



Figura 1. La red cristalina cuadrada. Los vecinos cercanos correspondientes al sitio (*na*, *ma*) se encuentran arriba y abajo, sobre la línea vertical, y a la derecha y a la izquierda, sobre la línea horizontal que pasan por dicho punto.

Red Cuadrada

Consideremos una red cuadrada, donde se acomodan "átomos" de una sola especie en una cuadrícula de espaciado a. La función de onda del sitio (x, y) = (na, ma), es llamada $\Psi_{n,m}$, de acuerdo la Figura 1. Tomando en cuenta solamente la interacción con sus vecino cercanos, es decir, con el electrón del átomo exactamente arriba, abajo (incrementando o disminuyendo una unidad de m a lo largo del eje y), el de la derecha y la izquierda (haciendo lo propio con n a lo largo del eje x) del sitio de interés, tenemos que [13]

$$-t[\Psi_{n-1,m} + \Psi_{n+1,m} + \Psi_{n,m-1} + \Psi_{n,m+1} + \Psi_{n,m}] = E\Psi_{n,m}$$

don de t es la integral de transferencia o de salto. Usando el teorema de Bloch bidimension al [13],

$$\Psi_{n,m} = e^{ik_x na} e^{ik_y ma} U(k_x, k_y),$$

podemos reducir la expresión en la forma

$$-t[e^{-ik_{x}a} + e^{ik_{x}a} + e^{-ik_{y}a} + e^{ik_{y}a}]U(k_{x}, k_{y}) = EU(k_{x}, k_{y}).$$

Con esto, obtenemos la forma del espectro de energía

$$-2t[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] = E$$

el cual se muestra en la Figura 2. Nótese que la expansión para $|\vec{k}| \rightarrow 0$ de la energía toma la forma,

$$E(\vec{k}) = -4t + \frac{1}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2)$$

donde m^* es la masa efectiva del portador de carga. Esta es una relación cuadrática entre la energía y el momento, porque la dinámica en este arreglo cristalino es mejor descrita por la ecuación de Schrödinger.



Figura 2. Estructura de bandas de energía para la red cuadrada bidimensional. El espectro es periódico en ambas direcciones. Los mínimos locales son aproximados de forma parabólica.

Influencia del Campo Magnético

Procedemos ahora a incluir la influencia del campo magnético en el espectro de energía. Consideremos un campo magnético uniforme perpendicular al plano del cristal. Recordemos que el operador del momento \vec{p} es el generador de traslaciones espaciales,

$$T(\vec{l}) = \exp(i\vec{p} \cdot \vec{l}),$$

don de $T(\vec{l})$ es el operador de traslación, el cual nos da el valor de la función de onda desplazada en la forma

$$\Psi(\vec{r} + \vec{l}) = T(\vec{l})\Psi(\vec{r}).$$

Si añadimos el campo magnético, el operador de momento \vec{p} se reemplaza por un

operador que incluye al potencial vectorial magnético $\vec{A}(\vec{x})$ [13], mediante $\vec{p} \rightarrow \vec{p} + e\vec{A}(\vec{x})$, que es la llamada sustitución de Peierls. Esto es, el efecto del campo magnético introduce un factor de fase extra en una función de onda trasladada. Así:

$$\Psi(\vec{r} + \vec{l}) = \exp\left(ie\int_{\vec{r}}^{\vec{r}+\vec{l}}\vec{A}\cdot d\vec{l}'\right)T(\vec{l})\Psi(\vec{r}).$$

Si el camino a lo largo del cual realizamos la integración es cerrado, la función de onda trasladada adquiere un factor de fase de la forma $\exp(i2\pi\alpha)$, donde α es el número de flujos cuánticos que pasan a través de la superficie encerrada por el camino. Además, si el potencial magnético está definido en la norma de Landau, $\vec{A}(\vec{x}) = (0, -Bx, 0)$, podemos reducir un problema 2-dimensional a uno 1-dimensional. De esta forma, la función de onda Ψ se puede escribir como el producto de una onda plana que depende solamente de y y una función ϕ que sólo depende de x, es decir,

$$\Psi(x,y) = e^{ip_y y} \phi(x),$$

donde podemos observar que el efecto del campo magnético solamente está presente en la dirección y del sistema coordenado. El teorema de Bloch, en este caso, adquiere la forma,

$$\Psi_{n,m} = e^{ik_x na} e^{ik_y ma} e^{2\pi i ma} \phi_n(x).$$

Con estos resultados, nuestra aproximación de amarre fuerte se escribe ahora como

 $-t[e^{-ik_{x}a}\phi_{n-1} + e^{ik_{x}a}\phi_{n+1} + 2\cos(2\pi am + k_{y}a)\phi_{n}] = E\phi_{n}.$

Ciencia Nicolaita No. 58

Sin pérdida de generalidad, tomamos $\vec{k} = \vec{0}$. Así, obtenemos la forma final de la ecuación de amarre fuerte, llamada *ecuación de Harper*,

$$-t[\phi_{n-1} + \phi_{n+1}] = [E + 2t\cos(2\pi\alpha m)]\phi_n.$$

Esta ecuación también describe a un electrón que se mueve a lo largo de una cadena lineal en un potencial periódico $V_m = \cos(2\pi\alpha m)$. La ec. de Harper ha sido estudiada en gran detalle, por ejemplo, en la Ref. [14]. Es interesante observar que esta ecuación posee una dualidad cuando el flujo magnético α es sustituido por su inverso, llamado σ . El espectro depende de σ , y se obtiene de diagonalizar el siguiente Hamiltoniano al tomar $\vec{k} = 0$,

$$H(k_{1}, k_{2}) = \begin{vmatrix} V_{0} & \lambda e^{-i\sigma bk_{1}} & 0 & \cdots & 0 & \lambda e^{i\sigma bk_{1}} \\ \lambda e^{i\sigma bk_{1}} & V_{1} & \lambda e^{-i\sigma bk_{1}} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ \lambda e^{-i\sigma bk_{1}} & 0 & 0 & \cdots & \lambda e^{i\sigma bk_{1}} & V_{n-1} \end{vmatrix}$$

donde $V_n = 2\cos(2\pi\sigma n + \sigma bk_1)$ es el potencial periódico. Los parámetros λ y *b* corresponden a la transformación conjugada de una rotación conmensurable y una dilatación, que es una simetría del problema que estamos estudiando. Una rotación arbitraria de la red cristalina por un ángulo θ en general no deja invariante al cristal.



Figura 3. La mariposa de Hofstadter. Cada punto en el espectro corresponde a un valor permitido para la energía El impacto del campo externo hace que dicho espectro adquiera una forma multifractal.

Sin embargo, si tomamos

$$\theta = \arctan\left(\frac{m_1}{m_2}\right),$$

Ciencia Nicolaita No. 58 27 Abril de 2013

con m_1 y m_2 enteros, primos relativos, decimos que la rotación es conmensurable. Cuando además de la rotación conmensurable, hacemos una dilatación del espaciamiento interatómico de la red tal que los eigenestados de la nueva red rotada estén reescalados por el factor e^{λ} , con

$$\lambda = \frac{1}{2}\ln(m_1^2 + m_2^2),$$

la operación conjugada de rotación conmensurable y dilatación es una simetría del sistema cristalino, lo cual es muy útil para explorar las simetrías del espectro de la ecuación de Harper [14]. Para diagonalizar el Hamiltoniano anterior $H(k_1, k_2)$, escribimos como $\sigma = {}^{q}/p$, con q y p enteros, primos relativos. Obtenemos así los eigenvalores para ese valor específico de σ . Barriendo todo el intervalo del inverso de flujo magnético, obtenemos los valores permitidos de la energía como función de σ . El resultado es el espectro conocido como la mariposa de Hofstadter [5], mostrado en la Figura 3. La mariposa de

conocido como la mariposa de Hofstadter [5], mostrado en la Figura 3. La mariposa de Hofstadter fue el primer fractal que se formuló en la física. Nos da una versión gráfica del espectro de energía de un electrón restringido a moverse en un potencial periódico bidimensional bajo la influencia de un campo magnético perpendicular. Para cada valor de

 σ , el espectro corresponde a q valores discretos. Si σ fuera un número irracional, el espectro correspondería a un conjunto infinito, no numerable de valores, que de hecho es

homeomorfo al conjunto de Cantor [10]. El hecho de que para valores irracionales de σ el espectro corresponda a un conjunto infinito de medida cero, hace que aun cuando se agregue el efecto de dichos valores, los niveles de energía se organizarán de acuerdo al patrón mostrado en la Figura 3. Podemos ver que el espectro posee dos ejes de simetr-

ia en $\epsilon = E/|t| = 0$ y en $\sigma = 1/2$. El ancho de banda, es decir, el intervalo donde yacen

todos los valores del espectro energía, es de 8t, pues el mínimo y el máximo eigenvalo-

res de $H(k_1, k_2)$ para cualquier valor de σ yace en el intervalo [-4t, 4t]. En nuestro caso

tomamos t = 1 por simplicidad. Réplicas de la figura de la mariposa, formada por las cuatro alas en forma de equis, se repiten reiteradamente al interior de la misma, escaladas por un factor que en general depende de la energía y del flujo magnético. Se dice entonces que la mariposa de Hofstadter tiene una estructura multifractal. A continuación nos proponemos repetir este ejercicio en el caso de la red hexagonal.



Figura 4. La red cristalina del grafeno. Posee una forma de panal de abeja.

Red Hexagonal

Sabemos que el grafeno tiene una estructura cristalina de tipo de panal de abeja [5,8,9]. En otras palabras, es una red con una estructura hexagonal, como se muestra en la Figura 4. Analicemos el modelo de amarre fuerte para este cristal, considerando sólo interacciones de los vecinos cercanos. Ya que trabajamos con una celda unitaria que contiene dos átomos en ella, clasificamos los átomos en dos subredes triangulares y etiquetamos los sitios de una de ellas con ϕ (círculos blancos) y a los de la otra red con ψ (círculos negros), como se aprecia en la Figura 4. La ecuación de amarre fuerte es en realidad un sistema de ecuaciones,

$$\begin{split} -t(\Phi_{n+1,m-1}+\Phi_{n+1,m+1}+\Phi_{n,m}) &= E\Psi_{n,m},\\ -t(\Psi_{n-1,m-1}+\Psi_{n-1,m+1}+\Psi_{n,m}) &= E\Phi_{n,m}. \end{split}$$

Ahora, los vectores primitivos de cada subred triangular son $\overrightarrow{a_1} = (\frac{\sqrt{3}a}{2}, \frac{a}{2})$, $\overrightarrow{a_2} = (\frac{\sqrt{3}a}{2}, -\frac{a}{2})$. Estos vectores cumplen con $|\overrightarrow{a_1}| = |\overrightarrow{a_2}| = a$, y en grafeno $a \approx 5A^\circ$. Los vectores primitivos de la red recíproca $\overrightarrow{b_1}$ y $\overrightarrow{b_2}$ satisfacen, $\overrightarrow{b_1} \cdot \overrightarrow{a_j} = 2\pi\delta_{ij}$, por lo que podemos darles la siguiente representación, $\overrightarrow{b_1} = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$ y $\overrightarrow{b_2} = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2})$. Entonces, el teorema de Bloch para la red hexagonal nos permite escribir,

$$\begin{split} \Psi_{n,m} &= \exp\left(\mathrm{i}\frac{\sqrt{3}}{2}k_xan + \frac{\mathrm{i}}{2}k_yam\right)U(\vec{k}),\\ \Phi_{n,m} &= \exp\left(\mathrm{i}\frac{\sqrt{3}}{2}k_xan - \frac{\mathrm{i}}{2}k_yam\right)V(\vec{k}). \end{split}$$

Por otro lado, las funciones $U(\vec{k}) \neq V(\vec{k})$ son periódicas sobre la red recíproca, es decir, $U(\vec{k} + \vec{G}) = U(\vec{k}), V(\vec{k} + \vec{G}) = V(\vec{k})$, donde $\vec{G} = n_1 \vec{b_1} + n_2 \vec{b_2} \neq n_1$, n_2 son enteros, lo que nos permite escribir

$$\begin{split} & \Psi_{n+1,m+1} = \exp\left[\mathrm{i}\frac{\sqrt{3}}{2}k_{x}a(n+1) + \frac{\mathrm{i}}{2}k_{y}a(m+1)\right]U(\vec{k}), \\ & \Psi_{n+1,m-1} = \exp\left[\mathrm{i}\frac{\sqrt{3}}{2}k_{x}a(n+1) + \frac{\mathrm{i}}{2}k_{y}a(m-1)\right]U(\vec{k}), \\ & \Phi_{n-1,m+1} = \exp\left[\mathrm{i}\frac{\sqrt{3}}{2}k_{x}a(n-1) - \frac{\mathrm{i}}{2}k_{y}a(m+1)\right]U(\vec{k}), \\ & \Phi_{n-1,m-1} = \exp\left[\mathrm{i}\frac{\sqrt{3}}{2}k_{x}a(n-1) - \frac{\mathrm{i}}{2}k_{y}a(m-1)\right]U(\vec{k}). \end{split}$$

Si sustituimos estas expresiones en el sistema de ecuaciones de amarre fuerte, tenemos

$$-t \left(2\exp\left(i\frac{\sqrt{3}}{2}k_{x}a\right)\cos\left(\frac{k_{y}a}{2}\right)+1\right)U(\vec{k}) = EV(\vec{k}),$$
$$-t \left(2\exp\left(-i\frac{\sqrt{3}}{2}k_{x}a\right)\cos\left(\frac{k_{y}a}{2}\right)+1\right)V(\vec{k}) = EU(\vec{k}).$$

Este nuevo sistema de ecuaciones puede escribirse en forma matricial como

$$H\begin{pmatrix} U(\vec{k})\\ V(\vec{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta(\vec{k})\\ \Delta^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U(\vec{k})\\ V(\vec{k}) \end{pmatrix} = E\begin{pmatrix} U(\vec{k})\\ V(\vec{k}) \end{pmatrix}.$$

De este modo, reducimos el problema de encontrar la estructura de bandas del panal de abejas a un problema de valores propios [15]. Elevando al cuadrado, tenemos que

$$\begin{pmatrix} \left| \Delta(\vec{k}) \right|^2 & 0 \\ 0 & \left| \Delta^*(\vec{k}) \right|^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U(\vec{k}) \\ V(\vec{k}) \end{pmatrix} = E^2 \begin{pmatrix} U(\vec{k}) \\ V(\vec{k}) \end{pmatrix},$$

de tal forma que los eigenvalores de la energía son

Ciencia Nicolaita No. 58



Figura 5. Estructura de bandas del grafeno. Cerca de los puntos de Dirac, la estructura de bandas es cónica, por lo que en esta región, los grafinos se comportan relativistamente.

El espectro correspondiente se muestra en la Figura 5. Tiene forma periódica en las bandas de conductividad y de valencia, tocándose solamente en seis puntos, sólo dos de los cuales son inequivalentes y son llamados puntos de Dirac. Entonces, las bandas de valencia y de conducción se tocan en puntos de Dirac, lo que nos dice que el

grafeno no es metal ni aislante. Se le clasifica como un semimetal. Cuando $|\vec{k}| \rightarrow 0$, podemos ver que

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

don de hemos identificado al factor $\sqrt{3}at/2$ con la velocidad de Fermi [8], que al remplazar los valores de la red cristalina, nos permite identificar $t \approx 2.7 eV$. Este Hamiltoniano es equivalente al de Dirac reducido a un plano [7]. La energía contiene dos signos (±), lo que refuerza la idea de que la dinámica de los portadores de carga de la red hexagonal está gobernada por la ecuación de Dirac. La forma cónica de la bandas de conducción y valencia cerca de los puntos de Dirac son llamados conos de Dirac y es cerca de estos

puntos donde precisamente se puede tener una descripción en términos completamente relativistas de un sistema de materia condensada [9]. Veamos el problema de Hofstadter para el grafeno.

Mariposa de Hofstadter-Dirac

Ahora estudiaremos el problema de Hofstadter para la red hexagonal. Como para la red cuadrada, todos los parámetros como la orientación del campo magnético, la norma de Landau, etc. se mantienen igual, sólo notamos que la integral de transferencia es

t' en la dirección horizontal y 1 en cualquier otra dirección. El efecto del campo magnético, es decir, la fase que toma la función de onda y que mide el flujo magnético en cada hexágono unitario, se refleja de la siguiente manera

$$-\Phi_{n+1,m-1} - \Phi_{n+1,m+1} - t' e^{-2\pi i \alpha m} \Phi_{n,m} = E \Psi_{n,m},$$

$$-\Psi_{n-1,m-1} - \Psi_{n-1,m+1} - t' e^{2\pi i \alpha m} \Psi_{n,m} = E \Phi_{n,m}.$$



Figura 6. Mariposa de Hofstadter-Rammal o Hofstadter-Dirac. Cada punto en el espectro corresponde a un valor permitido para la energía. El impacto del campo externo hace que dicho espectro adquiera una forma multifractal.

Entonces, el espectro lo obtenemos de resolver estas ecuaciones acopladas. Siguiendo el razonamiento de la sección anterior, luego de usar el teorema de Bloch para la red hexagonal, convertimos este sistema en un problema de eigenvalores que depende del inverso del flujo magnético. Al igual que antes, fijamos $\sigma = {q / p}$ y calculamos los eigenvalores. Barriendo el rango completo de σ , el resultado se muestra en la Figura 6. Podemos ver que el espectro posee dos ejes de simetría en $\epsilon = E/|t'| = 0$ y en $\sigma = {1/2}$. Además, aparecen dos mariposas similares a la cuadrada, una para $\epsilon > 0$ y la otra para $\epsilon < 0$. Aparecen réplicas de ésta mariposa, formadas por las cuatro alas, que se repiten

reiteradamente al interior de la misma, escaladas por un factor dependiente de la energía y del flujo magnético. La mariposa de Hofstadter-Dirac cuenta con una estructura multifractal. El espectro de energía que se muestra en la Figura 6 se obtuvo para t' = 1. Se puede ver que este espectro corresponde nuevamente a q bandas o valores discretos de la energía y que el ancho del intervalo de energías en este caso es en general 6t'.

Raíz cuadrada de una Mariposa

Una observación interesante ocurre cuando tomamos su cuadrado del Hamiltoniano de amarre fuerte para la red hexagonal,

$$H^2 \psi = \varepsilon \psi.$$

Numéricamente se obtiene nuevamente el espectro de la mariposa de Hofstadter cuadrada. Un análisis más cercano nos revela que en realidad dicho espectro está duplicado, uno con signo positivo y otro con signo negativo, y dadas las simetrías del mismo, parecen ser uno solo. Resulta sugerente, entonces, que el espectro correspondiente al cuadrado del Hamiltoniano para la mariposa de Hofstadter-Dirac resultaría en dos copias del espectro de Hofstadter, como se ilustra en la Figura 7. Desde el punto de vista de la ecuación de Dirac, esto resulta natural, pues como hemos visto, en su forma no relativista, en la imagen de Foldy-Whouthuysen, el espectro posee dos signos con la raíz cuadrada del eigenvalor de Dirac. Sin embargo, esta equivalencia puede observarse también de estudiar la red hexagonal de la forma descrita a continuación.



Figura 7. El cuadrado del espectro de la mariposa hexagonal es dos veces el espectro de la mariposa cuadrada.

Consideremos una nueva celda unitaria en la red hexagonal. Sea la nueva celda de tal forma que contenga dos átomos, vecinos cercanos. Por ejemplo, uno puede ver la Figura 4 los círculos blancos, que podemos tomar como los puntos de la red, y a cada uno de ellos asociarle el círculo negro que está justo arriba y un poco a su derecha, para formar la base de dos átomos distintos de esta estructura cristalina. Esta equivalencia también puede verse en forma analítica. Comenzaremos tomando la nueva celda unitaria

[16] de dos átomos en la red hexagonal y etiquetaremos los átomos con $\Psi_{n,m}$ y $\Phi_{n,m}$ respectivamente. Enseguida, tomemos las interacciones con los vecinos cercanos de acuerdo con la Figura 4 y escribimos el Hamiltoniano correspondiente.

$$-t(\Phi_{n+1,m-1} + \Phi_{n+1,m+1} + t'\Phi_{n,m}) = E\Psi_{n,m},$$

$$-t(\Psi_{n-1,m-1} + \Psi_{n-1,m+1} + t'\Psi_{n,m}) = E\Phi_{n,m}.$$

Notemos que la integral de salto en la dirección horizontal es diferente, en general, al de la dirección vertical. Para solucionar este problema, multiplicamos con t' a las funciones $\Psi_{n,m}$ y $\Phi_{n,m}$ para indicarlo. La equivalencia entre la red cuadrada de un átomo y la red hexagonal de dos átomos podemos obtenerla si tomamos la ecuación anterior, con t = 1, y realizamos dos operaciones por separado. La primera, una suma,

$$-\Phi_{n+1,m-1} - \Phi_{n+1,m+1} - \Psi_{n-1,m+1} - \Psi_{n-1,m-1} = (E + t')(\Psi_{n,m} + \Phi_{n,m}),$$

la otra operación que podemos realizar es la resta,

$$-\Phi_{n+1,m-1} - \Phi_{n+1,m+1} + \Psi_{n-1,m+1} + \Psi_{n-1,m-1} = (E - t')(\Psi_{n,m} - \Phi_{n,m})$$

Con este sistema de ecuaciones obtenemos la energía final para la red hexagonal de dos átomos, la cual consta de dos ramas de energía la primera es llamada "bonding" o enlace (correspondiente a la suma), en la cual la propiedad a tomar en cuenta es $\Psi_{n,m} = \Phi_{n,m}$ y la segunda es llamada "antibonding" o antienlace (correspondiente a la resta) se tomará $\Psi_{n,m} = -\Phi_{n,m}$. Comenzaremos con los cálculos del bonding. La ecuación de la suma se reduce a,

 $-\varPhi_{n+1,m-1}-\varPhi_{n+1,m+1}-\varPhi_{n-1,m+1}-\varPhi_{n-1,m-1}=2(E-t')\varPhi_{n,m}.$

Usamos ahora el teorema de Bloch bidimensional

$$\Psi = \Phi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,k_1 n} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2 m} U(\vec{k}),$$

la energía es entonces,

$$E = -t' - (\cos(k_1) + \cos(k_2)).$$

Un razonamiento análogo para el "antibonding", nos conduce a la energía es,

$$E = t' - (\cos(k_1) + \cos(k_2)).$$



Figura 8. La equivalencia de la red hexagonal con dos copias de la estructura de bandas para la red cuadrada.

Ambas soluciones de la energía se muestran en la Figura 8, donde la forma de estas energías encontradas es igual a la energía de la red cuadrada y es sólo la mitad, de acuerdo con la de la energía de la red cuadrada. De esta forma, vemos que la suma de las dos ramas es igual o equivalente a la energía encontrada en la red cuadrada con una celda unitaria de un solo átomo. La introducción del campo magnético se realiza en forma directa, con el razonamiento expuesto en la tercera sección de este trabajo. El ejercicio es directo y el lector interesado puede repetirlo de propia cuenta para verificarlo. Por tanto, confirmamos la observación inicial presentada al principio de esta sección. Con esto damos por terminado el trabajo de investigación.

Conlusión

Para concluir, mencionaremos los resultados obtenidos de forma breve. El propósito principal de este trabajo es el estudio de la dinámica de los electrones planares en presencia de campos magnéticos externos.

En sistemas periódicos, como sólidos cristalinos, el espectro de los electrones se encuentra formado por bandas de energía permitidas, separadas por brechas de energía

prohibidas. Esta estructura de bandas permite analizar las propiedades de conducción de un material. Para el caso de una red cuadrada bidimensional sin campo magnético, vemos que el movimiento del electrón es gobernado por la ecuación de Schrödinger, y el correspondiente espectro de energía en forma de sábana periódica, Figura 2, con mínimos parabólicos.

Al introducir un campo magnético perpendicular al cristal, definiendo el potencial vector en la norma de Landau, el espectro se ve afectado solamente en una dirección, se rompe la degeneración y las bandas de energía comienzan a cruzarse. Esto ocasiona que en ciertas regiones aparezcan bandas de energía permitidas y, en otras bandas prohibidas, ocasionando que el espectro tome una forma peculiar, conocida como la mariposa de Hofs- tadter, el cual tiene propiedades de multifractalidad.

Para la red bidimensional hexagonal, que es la estructura cristalina del grafeno, la estructura de bandas en ausencia de campos magnéticos es tal que las bandas de conducción y valencia se tocan en los puntos de Dirac, alrededor de los cuales los grafinos o portadores de carga son mejor descritos mediante funciones de onda ultrarelativistas. Al introducir un campo magnético uniforme, la correspondiente mariposa de Hofstadter-Dirac posee una estructura intrincada, multifractal y que es como la adición de dos copias del espectro de la mariposa de Hofstadter ordinaria. Esto se observa más claramente tomando el cuadrado del Hamiltoniano de amarre fuerte para la red hexagonal. Esta doble degeneración la podemos atribuir al carácter bipartita de la red hexagonal tomando que es equivalente a una red cuadrada monopartita y que duplica el espectro que encontramos con anterioridad.

El grafeno es excepcional por sus propiedades de dureza, conducción térmica, movilidad de sus portadores de carga, flexibilidad y otras que lo hacen atractivo como sucesor del silicio en aplicaciones nanotecnológicas. Por esto, concluimos que estudios de la naturaleza de este material arrojarán luz a posibles aplicaciones tecnológicas del mismo.

Agradecimientos

Agradecemos a CIC-UMSNH y CONACyT por apoyos recibidos durante la elaboración de este trabajo. Agradecemos al Dr. Luis Villaseñor, a Saúl Hernández y Khépani Raya por sus atinados comentarios y cuidadosa lectura del manuscrito.

Referencias

- [1] David J. Griffiths, "Introduction to Quantum Mechanics", 2a Ed. Pearson Prentice Hall, (2005), ISBN 0-13-111892-7.
- [2] David J. Griffiths, "Introduction to Elementary Particles", 1st. Ed. John Wiley & Sons Inc. (1987), ISBN 0-471-60386-4.
- [3] L. L. Foldy y S. A. Wouthuysen, Phys. Rev. 78, 29–36 (1950).
- [4] G. Murguía y A. Raya, J. Phys. A: Math. Gen. 43, 402005, (2010)

- [5] Novoselov, K. S. et al. "Two-dimensional gas of massles Dirac fermions in graphene". Nature 438, 197 (2005).
- [6] F. H. M. Faisal "Adiabatic solution of Dirac equation graphinos in an intense electromagnetic field and emission of high order harmonics near the Dirac points", ar-Xiv:1102.1677v2 [cond-mat.mes-hall].
- [7] S. Hernández Ortíz, G. Murguía y A. Raya, J. Phys. Condens. Matter 24, 015304 (2012).
- [8] A. K. Geim and K. S. Novoselov, "The Rise of Grafene", Manchester Center for Mesoscience and Nanotechnology, U. Manchester, Oxford Road M13 9PL, United Kindom.
- [9] M. I. Katsnelson and K. S. Novoselov, Graphene: new bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics, Solid State Commun. 143, 3 (2007).
- [10] D. R. Hofstadter, "Energy levels and wave fuctions of Bloch electrons in rational and irrational magnetics fields", Phys. Rev. B 14, 2239 (1976).
- [11] R. Rammal "Landau level of Bloch electons in a honeycomb lattice", J. Physique 46, 1345, (1985).
- [12] J. Manuel González-Valdés, "Electrones planares en un campo magnético", IFM-UMSNH (2012).
- [13] C. Kittel "Introduction to Solid State Physics", 7th ed. (Wiley, New York, 1996).
- [14] A. Kunold, "Electrones de Bloch y Efecto Hall Cuántico", Tesis Doctoral, Instituto de Física UNAM, (2003).
- [15] R. Delbourgo, "On 2D Periodic Hexagonal Cells", erXiv:1108.3817v1 [condmat.mtrl-sci].
- [16] A. Matulis and F. M. Peeters, "Analogy between one-dimentional chain model and graphene", Am. J. Phys., 77 595, (2009).