



Universidad Nacional Autónoma de México

UNAM

Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán

Licenciatura en Tecnología

Fenomenología de los Fermiones de Dirac sin masa

TESIS

Que para obtener el título de Licenciado en Tecnología

PRESENTA:

Francisco Javier De La Rosa Acevedo

Director de Tesis:

Dr. Ricardo Gaitán Lozano

Cuautitlán Izcalli, Estado de México 2022.



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Agradecimientos

Investigación realizada gracias al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de la UNAM <IN115319>. Agradezco a la DGAPA-UNAM por la beca recibida

Índice

1 Introducción	5
2 Objetivos	10
2.1 Objetivo general	10
2.2 Objetivos particulares	10
3 Hipótesis	10
4 Marco teórico	11
4.1 La ecuación de Dirac	11
4.1.1 Antecedentes Históricos	11
4.1.2 Formalismo matemático de la ecuación de Dirac	13
4.1.3 La ecuación de Weyl	22
4.2 El Grafeno	25
4.2.1 El átomo de carbono	25
4.2.2 Generalidades del Grafeno	26
4.2.3 Estructura electrónica del grafeno	27
4.3 Teorema de Bloch	32
4.4 Modelo Tight-Binding	33
4.5 Ecuación de Dirac en grafeno cerca los puntos de Dirac	38
4.6 El Neutrino	40
4.7 Fermiones de Dirac sin masa	42
5 Resultados y discusión	44
6 Conclusiones	45
7 Referencias bibliográficas	46

RESUMEN

Este trabajo se enfocará en el análisis y comportamiento de las partículas del tipo Fermiones de Dirac y su aparición en dos sistemas físicos distintos, uno perteneciente a la física de materiales en la nanoescala (grafeno) y otro perteneciente a la física de partículas elementales (neutrinos); se estudiará el caso especial en el que la masa en estos sistemas es cero y se discutirá la relación que existe entre ambos.

Se utilizará el modelo Tight-Binding para hallar la estructura de bandas del grafeno y posteriormente usar como principal argumento para hacer las aproximaciones necesarias para tratar al grafeno como un sistema donde emergen Fermiones de Dirac sin masa; se discutirá la relación de este sistema con la descripción matemática y física de estas partículas en el contexto de la mecánica cuántica relativista; se hará una comparación con los neutrinos y las propiedades intrínsecas que comparten ambos sistemas.

1 INTRODUCCIÓN

El estudio de las partículas subatómicas y sus interacciones en los distintos estados de la materia constituyen unos de los problemas fundamentales para la física del estado sólido y la materia condensada. En la mayoría de los sistemas atómicos, moleculares o sólidos de bajas dimensiones; la mecánica cuántica ha sido una teoría que ha funcionado bastante bien para la descripción de los fenómenos que ocurren a la escala donde la mecánica clásica falla; sin embargo, los fenómenos cuánticos presentan también comportamientos relativistas y en ciertos sistemas dan origen a efectos anómalos que no pueden ser explicados por la teoría cuántica. Debido a esto, es necesario el uso de otra teoría que tenga en cuenta dichos efectos para poder describir y predecir correctamente este tipo de sistemas; la mecánica cuántica relativista es una teoría que resulta ser bastante útil al estudiar estos sistemas cuando los efectos relativistas comienzan a ser relevantes, además de ser la conexión con la teoría cuántica de campos usada en física de partículas.

Al estudiar física es común hallar sistemas donde no es posible obtener soluciones exactas por lo que recurrimos a modelos aproximados que describan correctamente al sistema y sigan siendo congruentes con la teoría. Estos modelos han sido especialmente útiles en el área de semiconductores, sólidos cristalinos y nanoestructuras para predecir el comportamiento, propiedades electrónicas, ópticas, térmicas y mecánicas de los materiales.

Gracias al avance de la computación, la tecnología y el desarrollo de equipos dedicados a realizar experimentos cada vez con más precisión y confiabilidad hemos podido comprobar experimentalmente los resultados predichos por las teorías en diversas ramas de las ciencias exactas. Sin embargo, cada una tiene cierto alcance en la descripción de los fenómenos, por lo que estamos aún lejos de un modelo o teoría que sea capaz de describir todos los fenómenos físicos a todas las escalas de longitud y energía; no obstante, la aplicación de diferentes teorías y modelos para tratar un mismo fenómeno nos ayuda a encontrar los mecanismos fundamentales que dan origen a ellos.

Recientemente se ha hallado que existen sistemas nanométricos que exhiben comportamientos análogos a los ya conocidos en la física de altas energías; [17,18,19] esto nos permite usar el formalismo usado en esta área

de la física para explicar algunos fenómenos que se presentan en sistemas pertenecientes al área de la nanotecnología, además de ayudar a la comprensión de comportamientos exóticos característicos de sistemas cuántico-relativistas; tales comportamientos aún no son entendidos completamente y siguen siendo tema de investigación para científicos teóricos y experimentales de todo el mundo por su gran potencial en aplicaciones tecnológicas. Debido a esto, es interesante estudiar la naturaleza de estos fenómenos, ya que abren la posibilidad a la fabricación de nuevos dispositivos más eficientes energéticamente y capaces de manipular información cuántica a través de algunas propiedades en los materiales hasta ahora ignoradas, tales como la manipulación del spin en los portadores de carga, efectos de localización y confinamiento de partículas, superconductividad y efectos emergentes como el efecto Hall cuántico fraccionario[18], efecto túnel de Klein [17], entre otros.

Los nanomateriales y nanoestructuras son muy parecidos a los materiales ya conocidos en la actualidad, pero con la particularidad de que al menos una de sus dimensiones se encuentra en el orden de los cientos de nanómetros ($1\text{nm}=1\times 10^{-9}\text{m}$); gracias a esto sus propiedades difieren considerablemente de los materiales en “bulto” como suele llamárseles en la literatura a aquellos de dimensiones mayores.

Estos nanomateriales llegan a presentar comportamientos de naturaleza cuántica, fuertemente dependientes del arreglo atómico, del tipo de átomos involucrados y del entorno molecular al que están expuestos. Gracias a los métodos computacionales, modelos teóricos y a las técnicas experimentales para su síntesis, fabricación y caracterización hemos podido entender y modular los fenómenos que presentan estos nanomateriales, permitiendo su implementación en tecnologías actuales y futuras. Algunos ejemplos son dispositivos electrónicos y optoelectrónicos, pantallas flexibles, vehículos para el transporte de fármacos, biosensores, celdas fotovoltaicas, compositos, generación y almacenamiento de energía, etc.

Se sabe que el carbono es uno de los elementos químicos más versátiles, puede adoptar varias formas alotrópicas, como son el grafito, el diamante, grafito turboestático (amorfo), fullerenos, nanotubos de carbón y grafeno, mostrando comportamientos físicos, químicos y mecánicos distintos en cada una de sus formas. Una de las más interesantes es el grafeno, el cual es una

nanoestructura cristalina bidimensional formada únicamente por átomos de carbono dispuestos en una red hexagonal casi infinita; este nanomaterial exhibe propiedades únicas que no habían sido observadas antes en otro tipo de materiales [20] y que son de gran interés para diversas áreas tecnológicas, ambientales y de la salud. Algunas de las aplicaciones de este nanomaterial son: la creación de nuevos dispositivos electrónicos más eficientes energéticamente, como base de nuevos catalizadores en reacciones químicas, captura y almacenamiento de CO₂, separación de gases, biosensores de alta sensibilidad, electrónica flexible, estudio de fenómenos cuánticos y su aplicación en espintrónica, computación cuántica, entre otros.

Algunas de las propiedades ópticas y electrónicas del grafeno son debidas al comportamiento colectivo de los electrones y huecos en la red cristalina bidimensional que lo forma, que a su vez son resultado de la especial estructura de bandas electrónicas que posee.

En este nanomaterial los electrones se desplazan grandes distancias interatómicas sin ser dispersados, en lo que llamamos régimen cuasi balístico, es decir, casi sin pérdida de energía. Esto es debido a que no existe una brecha de energía entre la banda de conducción y la banda de valencia. Se sabe que los portadores de carga se comportan como partículas relativistas [1] con una velocidad apenas 300 veces inferior a la de la luz y masa efectiva muy reducida; se consideran cuasipartículas que están descritas por la ecuación de Dirac para fermiones sin masa en cierto régimen de energías cerca del nivel de Fermi, razón por la que en la literatura adoptan este nombre. Es curioso observar que dicha ecuación cuántico-relativista es también usada para describir otro tipo de fermiones llamados neutrinos, que también poseen una masa muy reducida [4] y espín $\frac{1}{2} \hbar$ pero no poseen carga eléctrica.

Los fermiones de Dirac sin masa [1,2] como se les ha llamado en la literatura a los electrones que cumplen con un comportamiento de partícula sin masa y que son descritos por la ecuación de Dirac, han sido observados en otros sistemas como en la superficie de aislantes topológicos, ciertos materiales bidimensionales [6] y otros compuestos orgánicos [2], presentando características muy similares a las que exhiben los portadores de carga en grafeno.

Al hallar la estructura de bandas del grafeno mediante el modelo de “Tight Binding” se observa que la banda de conducción y la banda de valencia se cruzan, formando una especie de conos (conos de Dirac) que se tocan únicamente en un punto (punto de Dirac) y donde justamente también se encuentra el nivel de Fermi. En la vecindad de estos puntos de Dirac se cumple una relación de dispersión lineal, la cual es característica de partículas sin masa. Haciendo una aproximación de masa efectiva igual a 0 podemos estudiar el comportamiento de los portadores de carga en este rango de energías, donde es válida una descripción en el régimen cuántico y relativista simultáneamente, y así usar el formalismo matemático y físico para tales casos; la forma de estos conos ha sido también comprobada experimentalmente mediante espectroscopía de fotoemisión resuelta por ángulo [21,22] (ARPES) (por sus siglas en inglés) y por espectroscopia Raman.

La relación entre los portadores de carga en grafeno y los neutrinos es debida a que en ambos casos la ecuación de Dirac describe al sistema, y la forma que toma en cada uno es equivalente; esta ecuación describe partículas relativistas de espín $\frac{1}{2} \hbar$ por lo que es válida para hacer una descripción de ambos sistemas. Los portadores de carga (electrones y huecos) en el grafeno se comportan como partículas relativistas sin masa en la vecindad del punto de Dirac; bajo estas circunstancias asemejan el comportamiento de los neutrinos y dan lugar a efectos poco convencionales en los materiales como la localización, el tunelaje de Klein y la presencia de un mínimo de conductividad que no baja de un valor (cuanto de conductancia $\frac{2e^2}{h}$) aun cuando la densidad de portadores de carga tiende a 0 [1].

Los neutrinos, a diferencia de los electrones son un tipo de partículas que presentan una naturaleza misteriosa y que aún no se comprende del todo; incluso el modelo estándar de partículas[24], que es la teoría mejor aceptada para la descripción de las fuerzas e interacciones fundamentales, los consideraba como partículas sin masa; hoy sabemos que si poseen masa aunque muy reducida; y son las únicas partículas que presentan el fenómeno de oscilación, debido a esto han sido objeto de estudio en varios experimentos a lo largo del mundo y los teóricos aún trabajan en

extensiones al modelo estándar para poder crear una teoría más completa y que pueda explicar su comportamiento y propiedades.

Los neutrinos al igual que los electrones, también son fermiones, poseen una masa muy reducida, siendo la partícula más ligera conocida; interactúan muy débilmente con la materia por lo que pueden viajar grandes distancias sin interactuar con otras partículas y por ende sin ser detectados. De acuerdo al modelo estándar poseen una propiedad llamada “sabor” la cual clasifica los neutrinos en 3 tipos: neutrino electrónico, neutrino muónico y neutrino tau; los neutrinos interactúan por medio de la fuerza nuclear débil y tienen naturaleza oscilatoria, es decir el estado de masa de un neutrino es una combinación de los estados de sabor; adicionalmente se ha propuesto que los neutrinos, serían tipo Dirac o tipo Majorana; sin embargo, su naturaleza aún es desconocida.

En el caso de los neutrinos del tipo Dirac, neutrinos y antineutrinos difieren por el número leptónico y la helicidad, de modo que el neutrino tiene helicidad izquierda y el antineutrino helicidad derecha. En el caso de los neutrinos tipo Majorana el neutrino y el antineutrino son simplemente 2 estados de la misma partícula, es decir, el neutrino es su propia antipartícula.

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivo general

Comprender la fenomenología de los Fermiones de Dirac para el caso no masivo utilizando el formalismo físico y matemático de la teoría cuántica relativista, para analizar un sistema en la nanoescala donde emergen este tipo de partículas y entender las consecuencias que derivan de su aparición; finalmente, comparar las propiedades halladas en este sistema con las propiedades intrínsecas de los neutrinos y su analogía con efectos ya conocidos en la electrodinámica cuántica.

2.2 Objetivos Particulares

Comprender el modelo Tight-Binding usado en grafeno y analizar la estructura de bandas.

Hallar las soluciones generales de la ecuación de Dirac para el caso masa cero e interpretar estas soluciones para describir ambos sistemas, grafeno y neutrinos.

Utilizar los resultados teóricos y experimentales hallados en la literatura para discutir similitudes entre ambos sistemas.

3 HIPÓTESIS

Utilizando las aproximaciones adecuadas en un sistema complejo como es el grafeno podemos trasladar el conocimiento de la teoría cuántica relativista para describir las propiedades electrónicas de un nanomaterial y comprender los fenómenos que se presentan en este cuando los efectos relativistas son relevantes.

4 MARCO TEORICO

4.1 La ecuación de Dirac

4.1.1 Antecedentes Históricos

Desde el experimento de la doble rendija propuesto por Thomas Young en 1801 y sus peculiares resultados, los físicos comenzaron a proponer modelos completamente diferentes a los usados hasta entonces para la descripción de la materia. Idearon describir a las partículas como si se tratase de ondas, pues los resultados experimentales asemejaban este comportamiento, por lo que los físicos de la época se vieron en la necesidad de proponer leyes contraintuitivas para describir los fenómenos que presentaba la materia a escalas muy pequeñas, donde la mecánica clásica usada hasta la fecha fallaba.

Para 1918 un físico alemán llamado Max Planck había ganado el premio Nobel de Física por resolver el problema de la radiación de cuerpo negro, proponiendo que la energía se emite y absorbe en paquetes discretos de energía llamados cuantos, los cuales serían producto de una constante ($h=6,62 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$) por la frecuencia de oscilación " ν " del sistema.

Louis de Broglie en 1924 propuso que las partículas presentan comportamiento dual, tanto de ondas como de partículas y que a cada partícula en movimiento se le puede asociar una onda en función de su energía dada por la ecuación $\lambda = \frac{h}{mv}$, donde λ es la longitud de onda, m es la masa, v es la velocidad de la partícula y h la constante de Planck.

En los años posteriores se descubrieron más características propias de las partículas como el principio de exclusión de Pauli (aplicable a fermiones) y el principio de incertidumbre de Heisenberg. Estas hipótesis tuvieron gran éxito y lograron solucionar varios problemas de la física que rige a los componentes más pequeños de la materia conocidos hasta entonces.

Erwin Schrödinger, Werner Heisenberg, Max Born y Pascual Jordan desarrollaron el formalismo matemático de la teoría cuántica, de la cual existían dos formulaciones. La primera desarrollada por Schrödinger en 1925, llamada mecánica ondulatoria proponía el comportamiento ondulatorio de las partículas y asociaba una función, llamada función de onda, que dependería de la posición y del tiempo. Basándose en los

principios de la mecánica de Hamilton llegó a una ecuación para predecir la evolución temporal, pero con un cierto grado de incertidumbre. La segunda variante de la teoría formulada por Heisenberg, Born y Jordan, llamada mecánica matricial, se basaba en el principio de incertidumbre y la representación del momento y posición como matrices u operadores que se multiplican. Ambas teorías son equivalentes en resultados y predicciones.

Paul Dirac en 1925 logró desarrollar una teoría cuántica no relativista que unificaba los conceptos de la mecánica ondulatoria y la matricial asociando magnitudes medibles a los operadores matemáticos que aplicaban sobre la función de onda; posteriormente la complementó con los conceptos cuánticos del campo electromagnético.

Esta teoría fue bastante acertada y durante el siglo XX ayudó a explicar los fenómenos relacionados con partículas subatómicas, incluso antes del descubrimiento de varias de ellas.

Sin embargo, con el tiempo se descubrieron algunos fenómenos como el espín y las antipartículas, los cuales no tenían explicación dentro de la teoría cuántica.

En 1915 Albert Einstein concluyó su teoría de la relatividad general la cual después de ser comprobada en varias ocasiones se convirtió en uno de los más grandes logros de la física de la época. Simultáneamente la teoría cuántica también había triunfado experimentalmente; los científicos entonces se dedicaron a averiguar si estas dos teorías podrían ser compatibles.

En 1928 Paul Dirac dedujo una ecuación que era la versión relativista de la ecuación de Schrödinger debido a que concordaba con los principios de la mecánica cuántica y la relatividad especial. Esta ecuación describe a los fermiones con espín $\frac{1}{2} \hbar$, como los electrones, y fue empleada con éxito en otro tipo de partículas como los neutrinos; también se ha demostrado que describe correctamente el comportamiento de los electrones en algunos materiales cristalinos que cumplen ciertas características especiales al interactuar con la red y con otras cuasipartículas.

4.1.2 Formalismo matemático de la ecuación de Dirac

La ecuación de Dirac es una ecuación cuántico-relativista debido a que es consistente con los postulados de la mecánica cuántica y la teoría especial de la relatividad. Busca solucionar los problemas que la ecuación de Klein-Gordon presenta en la interpretación de densidad de probabilidad negativa; además, esta ecuación es capaz de incluir una característica intrínseca de las partículas, el spin, y es la base de la teoría cuántica de campos la cual es fundamental para el estudio de la física de partículas elementales.

Para entender la ecuación de Dirac se hace una introducción a la ecuación de Klein-Gordon la cual es válida en la interpretación de campos de espín cero.

Durante el desarrollo de este trabajo se utilizarán unidades naturales:

$$\hbar = 1 = c$$

Partamos de la relación de energía-momento relativista

$$E^2 = p^2 + m^2 \quad (2.1)$$

De la mecánica cuántica sabemos que podemos representar ciertas cantidades físicas por operadores, en este caso:

$$\text{Energía } \hat{E} \rightarrow i\partial_t$$

$$\text{Momento } \hat{p} \rightarrow -i\vec{\nabla}$$

Sustituyendo (2.1) por los operadores correspondientes obtenemos:

$$(i\partial_t)^2 = (-i\vec{\nabla})^2 + m^2$$

Desarrollando podemos escribir lo anterior como:

$$-\partial_t^2 = -\vec{\nabla}^2 + m^2$$

$$\partial_t^2 - \vec{\nabla}^2 + m^2 = 0 \quad (2.2)$$

Esta relación entre la energía y el momento es consistente con la relatividad y puede escribirse de una manera más formal usando cuadvectores.

Definimos un cuadvector covariante como:

$$x_\mu = (x_0, x_1, x_2, x_3),$$

donde la coordenada temporal esta denotada por el subíndice 0 y $\mu = 0,1,2,3$

Un vector contravariante invierte el signo de las componentes espaciales y se denota usando un superíndice,

$$x^\mu = (x^0, -x^1, -x^2, -x^3)$$

podemos subir o bajar el índice de un cuadrivector usando el tensor métrico de Minkowsky definido por

$$g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$x_\mu = g_{\mu\nu}x^\nu$$

Definimos el producto interno de 2 cuadri-vectores como:

$$x^\mu y_\nu = x_\mu y^\nu = x^0 y_0 - (x^1 y_1, x^2 y_2, x^3 y_3) = x^0 y_0 - x^1 y_1 - x^2 y_2 - x^3 y_3$$

Ahora definamos el cuadrivector para el gradiente como:

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$\partial^\mu = \left(\frac{\partial}{\partial t}, -\frac{\partial}{\partial x}, -\frac{\partial}{\partial y}, -\frac{\partial}{\partial z} \right) = (\partial_t, -\vec{\nabla}).$$

Debido a que

$$\partial^\mu g^{\mu\nu} \partial_\nu = \partial^\mu \partial_\mu = \partial_\mu \partial^\mu$$

podemos escribir la ecuación (2.2) usando esta notación; actuando sobre una función de onda Ψ se puede escribir de la siguiente manera:

$$(\partial^\mu \partial_\mu + m^2)\Psi = 0 \tag{2.3}$$

Esta es la ecuación de Klein-Gordon; vemos que es una ecuación diferencial parcial donde las derivadas espaciales y temporales aparecen a segundo orden. A diferencia de la ecuación de Schrödinger, la ecuación de Klein-Gordon es invariante bajo transformaciones de Lorentz, lo que es requisito para ser una ecuación consistente con la teoría relativista y cuántica a la vez.

La ecuación de Klein-Gordon en la interpretación de partículas presenta dos problemas fundamentales cuando hallamos la solución general, por lo que fue desechada en su momento.

Para hacer evidente estos problemas presentemos la solución general.

De la física clásica sabemos que la existencia de ondas planas del tipo $\Psi(r, t) = \exp i(k \cdot r - \omega t)$ surgen de la relación de dispersión.

$$\omega^2 - k^2 = m^2$$

Además, sabemos que se siguen satisfaciendo las relaciones propuestas por de Broglie y Einstein

$$p = \hbar k, \quad E = \hbar \omega$$

Por lo que podemos sustituir estas variables en la relación de dispersión original; nos damos cuenta de que la ecuación resultante no es más que la relación energía-momento relativista $E^2 = p^2 + m^2$, lo cual nos indica que una partícula que cumple con la relación anterior puede ser representada por ondas planas.

Dado un momento \vec{p} la ecuación de Klein-Gordon tiene soluciones de onda plana del tipo

$$\Psi(r, t) = N \exp i(\vec{p} \cdot \vec{r} - E(\vec{p})t)$$

siendo N una constante de normalización; sustituyendo esta solución en (2.3) obtenemos la relación

$$E^2 \Psi = p^2 \Psi + m^2 \Psi$$

por lo que la energía de la partícula estaría dada por

$$E = \pm \sqrt{p^2 + m^2}.$$

Esta última expresión nos indica la existencia de 2 soluciones, una de energía positiva y otra de energía negativa; lo cual en su momento representaba un problema ya que no se sabía cómo interpretar energías negativas; pero hoy sabemos que estas soluciones están asociadas a las antipartículas. Sin embargo, existe un segundo problema asociado a la densidad de probabilidad en la ecuación de Klein-Gordon.

Tomando la solución de ondas planas el cuadvivector para la densidad de probabilidad y corriente $j_{KG}^\mu(\rho, \vec{j}) = 2p^\mu |N|^2$ implica densidades de probabilidad negativas, lo cual claramente era imposible. Debido a esto se concluyó que esta ecuación no daba una descripción física adecuada para partículas relativistas; este problema surge debido a que las derivadas aparecen a segundo orden, ya que para hallar una solución deberíamos conocer tanto Ψ como $\partial_t \Psi$ en $t = 0$.

Para obtener la ecuación de Dirac recordemos que el operador hamiltoniano da la energía del sistema $\hat{E} = \hat{H}$

además, buscamos que se siga cumpliendo la relación energía-momento

$$E^2 = p^2 + m^2$$

que en términos de los operadores correspondientes se convierte en:

$$(i\partial_t)^2 = (-i\vec{\nabla})^2 + m^2$$

$$\hat{E}^2 = \hat{H}^2$$

De este modo el Hamiltoniano de Klein-Gordon se identifica como:

$$H_{K-G} = (-i\vec{\nabla})^2 + m^2 .$$

Dirac propuso que el Hamiltoniano de K-G realmente era el cuadrado de un Hamiltoniano previo; esto podría solucionar el problema de las derivadas de segundo orden en la ecuación.

Por lo que se propone el siguiente Hamiltoniano, donde α y β serían constantes a determinar:

$$H_D = (\vec{\alpha}) \cdot (-i\vec{\nabla}) + (\beta) m .$$

Actuando sobre una función de onda, se obtiene:

$$i\partial_t \Psi = \left((\vec{\alpha}) \cdot (-i\vec{\nabla}) + (\beta) m \right) \Psi \quad (2.4)$$

Si esto es verdadero, al elevar este hamiltoniano al cuadrado deberíamos recuperar el Hamiltoniano de K-G

$$(i\partial_t)^2 \Psi = \left(-i\alpha_x \frac{\partial}{\partial x} - i\alpha_y \frac{\partial}{\partial y} - i\alpha_z \frac{\partial}{\partial z} + \beta m \right)^2 \Psi$$

Al desarrollar los términos observamos que la única forma de que esto se cumpla es que las constantes α y β sean matrices y cumplan las siguientes relaciones de anticonmutación:

$$\begin{aligned}\alpha_i^2 &= \beta^2 = I \\ \{\alpha_i, \alpha_j\} &= 2\delta_{ij}I \\ \{\alpha_i, \beta\} &= 0 \\ \text{Con } i &\neq j\end{aligned}$$

Debido a que la energía es eigenvalor de H , este debe ser hermítico con autovalores reales, y por lo tanto α_i y β también deben serlo.

$$\begin{aligned}H &= H^\dagger = (H^T)^* \\ \alpha_i &= \alpha_i^\dagger \\ \beta &= \beta^\dagger\end{aligned}$$

Ahora hallemos las propiedades de estas matrices y sus eigenvalores.

$$\begin{aligned}\alpha_i X &= \lambda X \quad \text{si } \alpha_i^2 = I \\ \alpha_i \alpha_i X &= \alpha_i \lambda X \quad \Rightarrow IX = \lambda^2 X \quad \Rightarrow \lambda = \sqrt{\pm 1} \quad \Rightarrow \lambda = \pm 1\end{aligned}$$

El procedimiento es similar para β .

Recordando la propiedad de la traza, $Tr[ABC] = Tr[CBA]$ y $\alpha_i \beta = -\beta \alpha_i$ se deduce que:

$$\begin{aligned}Tr[\alpha_i \beta \beta] &= Tr[-\beta \alpha_i \beta] \\ Tr[\alpha_i I] &= Tr[-\beta \beta \alpha_i] \\ Tr[\alpha_i] &= Tr[-\alpha_i] = -Tr[\alpha_i]\end{aligned}$$

Esto solo se cumple si $Tr[\alpha_i] = Tr[\beta] = 0$.

Debido a que la traza de α_i y β es nula y que la suma de los eigenvalores debe ser igual a su traza, α_i y β deben ser matrices cuadradas de dimensión par.

El objeto matemático de menor dimensión que cumple lo anterior son matrices 4×4 , por lo tanto H_D es una matriz 4×4 actuando sobre una función de onda de 4 componentes llamada espinor de Dirac, el cual puede ser escrito como un vector columna.

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

Las matrices que cumplen con (2.4) no son únicas; convencionalmente se usan las matrices de spin de Pauli para representar α_i y β :

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

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$$

La ecuación (2.4) es conocida como la ecuación de Dirac; para escribirla en su forma covariante partimos de (2.4) y multiplicamos por β

$$i\beta \frac{\partial \Psi}{\partial t} + i\beta \alpha_x \frac{\partial \Psi}{\partial x} + i\beta \alpha_y \frac{\partial \Psi}{\partial y} + i\beta \alpha_z \frac{\partial \Psi}{\partial z} - \beta^2 m \Psi = 0 \quad (2.5)$$

En la representación de Dirac definimos las matrices γ como:

$$\gamma^0 \equiv \beta \quad \gamma^1 \equiv \beta \alpha_x \quad \gamma^2 \equiv \beta \alpha_y \quad \gamma^3 \equiv \beta \alpha_z$$

Usando esta definición reescribimos (2.5) en la forma

$$i\gamma^0 \frac{\partial \Psi}{\partial t} + i\gamma^1 \frac{\partial \Psi}{\partial x} + i\gamma^2 \frac{\partial \Psi}{\partial y} + i\gamma^3 \frac{\partial \Psi}{\partial z} - Im \Psi = 0.$$

Podemos escribir estas matrices gamma de una forma compacta usando la notación siguiente, pero recordando que no forman un cuadrivector ya que no se transforma como tal:

$$\gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2, \gamma^3)$$

Estas matrices cumplen con las siguientes propiedades

$$(\gamma^0)^2 = 1 \quad (\gamma^i)^2 = -1 \quad \gamma^0 \gamma^i + \gamma^i \gamma^0 = 0 \quad \text{con } i = 1,2,3$$

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 0 \quad \text{para } \mu \neq \nu$$

Equivalentemente, usando la relación de anticonmutación y el tensor métrico, podemos escribir

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} \quad \text{con } \mu, \nu = 0,1,2,3$$

Sustituyendo las matrices γ^μ en (2.5), escribimos la ecuación de Dirac en su forma covariante:

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\Psi = 0 \quad (2.6)$$

Para un fermión libre, es decir sin estar sujeto a un potencial, el ansatz de onda plana nos ayuda a proponer una función de onda Ψ que sea solución de la ecuación de Dirac de la forma:

$$\Psi(\vec{r}, t) = u(\vec{p}) \exp i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et) \quad (2.7)$$

donde identificamos la exponencial como una onda plana y $u(E, \vec{p})$ es un espinor de Dirac de 4 componentes.

Para una partícula en reposo, es decir, $\vec{p} = 0$ la solución (2.7) propuesta sería:

$$\Psi(\vec{r}, t) = u(E) \exp i(-Et)$$

Debido a que $\vec{p} = 0$ las derivadas espaciales son nulas y podemos escribir (2.6) como

$$\left(i\gamma^0 \frac{\partial}{\partial t} - m\right)\Psi = 0$$

$$i\gamma^0(-iE)\Psi - m\Psi = 0$$

$$(\gamma^0 E - m)\Psi = 0$$

$$E\gamma^0\Psi = m\Psi$$

$$E \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = m \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}$$

Esta es una ecuación de eigenvalores con 4 soluciones independientes, 2 corresponden a $E=m$ y dos para $E=-m$; estas soluciones llamadas espinores, describen el spin de partículas y antipartículas.

$$u_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Cada espinor “u” es una matriz 1x4 de 4 componentes, cada una de las funciones de onda asociadas al fermión representa un estado, los espinores representan dos pares de estados de spin (\uparrow, \downarrow), mientras que las exponenciales representan otros dos estados de energía, $E = m$ y $E = -m$.

Finalmente, las funciones de onda asociadas al fermión son:

$$\psi^1 = e^{-imt}u^1 \quad \psi^2 = e^{-imt}u^2 \quad \psi^3 = e^{imt}u^3 \quad \psi^4 = e^{imt}u^4$$

Hallemos ahora la solución para una partícula en movimiento con momento \vec{p} ; partimos nuevamente de la solución propuesta (2.7).

$$\Psi(\vec{r}, t) = u(\vec{p}) \exp i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et) \quad (2.8)$$

Observemos que la dependencia temporal y espacial aparecen solo en el exponente mientras que el espinor solo tiene dependencia en el momento, por lo tanto, las derivadas ∂_μ solo actúan en el exponente de Ψ , es decir

$$\partial_0\Psi = -iE\Psi \quad \partial_1\Psi = ip_x\Psi \quad \partial_2\Psi = ip_y\Psi \quad \partial_3\Psi = ip_z\Psi$$

Sustituyendo las derivadas anteriores en la ecuación de Dirac (2.6) y quitando el termino exponencial tenemos

$$\begin{aligned} (\gamma^0 E - \gamma^1 p_x - \gamma^2 p_y - \gamma^3 p_z - m)\Psi &= 0 \\ (\gamma^0 E - \gamma^1 p_x - \gamma^2 p_y - \gamma^3 p_z - m) u(E, \vec{p}) \exp i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et) &= 0 \end{aligned}$$

De forma compacta

$$(\gamma^\mu p_\mu - m)u(\vec{p}) = 0 \quad (2.9)$$

Esta es la ecuación de Dirac en el espacio de momentos, es una ecuación únicamente del espinor “u” que depende del momento.

Si sustituimos las matrices gamma por su definición, en la representación de Dirac, la ecuación (2.9) se puede escribir como:

$$\begin{aligned} \beta E - \vec{\sigma} \cdot \vec{p} - mI &= 0 \\ \begin{pmatrix} (E - m) & -\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & -(E - m) \end{pmatrix} &= 0 \end{aligned}$$

En esta matriz 2x2 cada elemento es en sí mismo una matriz 2x2; en virtud de esto escribimos el espinor como un biespinor de 2 componentes

$$u(\vec{p}) = \begin{pmatrix} u_A \\ u_B \end{pmatrix}$$

En forma matricial (2.9) puede escribirse como

$$\begin{pmatrix} (E - m) & -\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & -(E - m) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_A \\ u_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Generando dos ecuaciones acopladas

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})u_B = (E - m)u_A \quad (2.10)$$

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})u_A = (E + m)u_B \quad (2.11)$$

De (2.11) obtenemos

$$u_B = \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})u_A}{(E + m)}$$

Debido a que u_A es un biespinor elegimos los valores más sencillos

$$u_{B1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{ó} \quad u_{B2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

de este modo podemos hallar 2 de los espinores u_B

$$u_1 = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_z}{E+m} \\ \frac{p_z+ip_y}{E+m} \end{pmatrix} \quad u_2 = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{p_x-ip_y}{E+m} \\ \frac{-p_z}{E+m} \end{pmatrix},$$

siendo N el factor de normalización.

El procedimiento es similar para hallar los espinores u_A

$$u_A = \frac{(-\vec{\sigma} \cdot \vec{p})u_B}{(E + m)}$$

Las soluciones de $E < 0$ en (2.10) serían las siguientes:

$$u_3 = N \begin{pmatrix} \frac{p_z}{E - m} \\ \frac{p_z + ip_y}{E - m} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u_4 = N \begin{pmatrix} \frac{p_z - ip_y}{E - m} \\ -p_z \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Finalmente, las soluciones para una partícula en movimiento son

$$\begin{aligned} \psi^1 &= u_1 e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)} , & \psi^2 &= u_2 e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)} \\ \psi^3 &= u_3 e^{-i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)} , & \psi^4 &= u_4 e^{-i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)} \end{aligned}$$

4.1.3 La ecuación de Weyl

La ecuación de Weyl es una ecuación cuántico-relativista que describe fermiones no masivos de spin 1/2 cuyo campo cuántico está descrito por 4 componentes (bispinor), es decir cada espinor con 2 componentes. En física de partículas no se conoce ninguna partícula fundamental que sea descrita por esta ecuación; sin embargo, en física del estado sólido describe a los materiales conocidos como semimetales de Weyl. En estos materiales los estados que representan a los electrones y huecos a cierta energía son descritos como cuasipartículas del tipo fermiones de Weyl; con la peculiaridad de que aparecen siempre en pares, así por cada cuasipartícula de Weyl con quiralidad derecha aparece otra con quiralidad izquierda. Además, estos estados son robustos ante perturbaciones lo que puede ser usado en áreas de interés tecnológico como la computación cuántica.

Para llegar a la ecuación de Weyl partimos de la ecuación de Klein-Gordon (2.2) y la describimos de la siguiente forma:

$$(\partial_t^2 - \vec{\nabla}^2)\phi = m^2\phi \quad (2.12)$$

Proponemos la siguiente factorización del lado izquierdo

$$(i\partial_t + \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla})(i\partial_t + \vec{\beta} \cdot \vec{\nabla})$$

donde $\vec{\alpha}$ y $\vec{\beta}$ son 3-vectores independientes de las coordenadas y de sus derivadas; al desarrollar los términos obtenemos

$$-\partial_t^2 + i(\vec{\alpha} + \vec{\beta}) \cdot \vec{\nabla} \partial_t + (\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla})(\vec{\beta} \cdot \vec{\nabla}).$$

Para recuperar el lado izquierdo de la ecuación de K-G se debe cumplir que:

$$\vec{\beta} = -\vec{\alpha} \quad (2.13)$$

$$(\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla})(\vec{\beta} \cdot \vec{\nabla}) = -\vec{\nabla}^2 \quad (2.14)$$

Esto implica que $\alpha_i^2 = 1$; definiendo $\vec{\alpha} = i\vec{\sigma}$ se obtiene $(\sigma_i)^2 = 1$.

Debido a la condición (2.14) y al convenio de suma sobre índices repetidos se cumple

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$$

Cumpléndose lo anterior podemos reescribir (2.12) como

$$(i\partial_t + i\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla})(i\partial_t - i\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla})\phi = m^2\phi$$

Debido a que cada factor del lado izquierdo es un operador aplicado a ϕ el resultado será un objeto de la misma naturaleza; podemos escribir:

$$(i\partial_t + i\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla})\phi = m\chi$$

$$(i\partial_t - i\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla})\chi = m\phi$$

Ya que σ_i son matrices 2x2 actuando sobre ϕ y χ estos deben ser también objetos de dos componentes, llamados espinores de Weyl derecho e izquierdo, respectivamente; físicamente representan partículas y antipartículas de spin $\frac{1}{2}\hbar$.

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} \quad \chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}$$

Las ecuaciones ahora tienen un nuevo grado de libertad, el spin; reacomodando los términos obtenemos las ecuaciones de Weyl acopladas por el término de masa

$$i\partial_t\phi = i\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}\phi + m\chi$$

$$i\partial_t\chi = -i\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}\chi + m\phi$$

En el caso de masa cero las ecuaciones se desacoplan

$$(E - \vec{\sigma} \cdot \vec{p})\phi = 0 \quad (2.15)$$

$$(E + \vec{\sigma} \cdot \vec{p})\chi = 0 \quad (2.16)$$

Reordenando términos obtenemos:

$$E\phi = \vec{\sigma} \cdot \vec{p}\phi \quad (2.17)$$

$$E\chi = -\vec{\sigma} \cdot \vec{p}\chi \quad (2.18)$$

Al desaparecer el término de masa se pierde la necesidad de describir la partícula con dos espinores ya que la matriz β es la responsable de obligar a construir matrices 4x4; de este modo, podemos utilizar únicamente un espinor (espinor de Weyl) para describir cada una de las ecuaciones de Weyl. Este par de ecuaciones violan la paridad debido a que se pueden escribir y usar por separado para describir fermiones derechos e izquierdos, y en su momento se consideraron sin sentido físico debido a lo anterior; sin embargo, cuando Landau y Salam en 1957 comprobaron la violación de la paridad, esta ecuación se tomó como la ecuación que describía al neutrino.

Explícitamente estas ecuaciones matriciales se escriben:

$$E\phi_1 = p_z\phi_1 + (p_x - ip_y)\phi_2 \quad (2.19)$$

$$E\phi_2 = (p_x + ip_y)\phi_1 - p_z\phi_2 \quad (2.20)$$

$$E\chi_1 = -p_z\chi_1 - (p_x - ip_y)\chi_2 \quad (2.21)$$

$$E\chi_2 = -(p_x + ip_y)\chi_1 + p_z\chi_2 \quad (2.22)$$

(2.19), (2.20) corresponden a (2.15) y (2.21), (2.22) a (2.16).

Si elegimos \vec{p} a lo largo del eje z de modo que $p_z = |\vec{p}|$

$$E\phi_1 = p_z\phi_1 = |\vec{p}|\phi_1$$

$$E\phi_2 = -p_z\phi_2 = -|\vec{p}|\phi_2$$

$$E\chi_1 = -p_z\chi_1 = -|\vec{p}|\chi_1$$

$$E\chi_2 = p_z\chi_2 = |\vec{p}|\chi_2$$

Estas últimas ecuaciones son de especial relevancia debido a que para cada signo de energía E corresponde una orientación del spin respecto a la dirección del momento \vec{p} , de modo que

$$E = \pm |\vec{p}|$$

que es la relación existente entre la energía y el momento de una partícula que se mueve a la velocidad de la luz.

Elegimos una base para ϕ_1, ϕ_2 y para χ_1, χ_2

$$\phi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \phi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \chi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Las soluciones de onda plana de este par de ecuaciones entonces son:

$$\chi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)}$$

$$\phi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)}$$

Es importante hacer notar que los espinores de Weyl son eigenestados del operador de helicidad y sus eigenvalores son 1 y -1 respectivamente

$$\frac{\sigma \cdot p}{|p|} \phi = \frac{\pm 1}{|p|}$$

4.2 El Grafeno

4.2.1 El átomo de carbono

Sabemos que el carbono es uno de los elementos más abundantes en el planeta, es uno de los elementos más versátiles para formar compuestos y es la base constitutiva de moléculas orgánicas; tiene número atómico 6 y posee cuatro electrones de valencia, característica que le permite formar enlaces covalentes hasta con otros 4 átomos del mismo o diferente tipo; también es capaz de formar enlaces sencillos, dobles y triples para formar cadenas largas, cadenas ramificadas, anillos e incluso formar diversas estructuras hibridando sus orbitales atómicos.

En la naturaleza podemos encontrar al carbono en distintos ordenamientos formando diversas moléculas o estructuras extendidas con distintas hibridaciones; algunos ejemplos son: el diamante donde los carbonos presentan una configuración tetraédrica con hibridación sp^3 , el grafito y grafeno con una configuración trigonal plana e hibridación sp^2 , con los carbonos dispuestos sobre un plano formando ángulos de 120° entre ellos y moléculas como el dióxido de carbono con geometría lineal e hibridación sp . Además de estos, también puede formar diversas estructuras enlazándose únicamente a otros átomos de carbono formando, nanotubos de carbono, fullerenos, puntos y cintas cuánticas etc.

4.2.2 Generalidades del Grafeno

El grafeno, según la definición de la IUPAC [23], es una única lámina de grafito aislada; se considera un nanomaterial en 2 dimensiones que está formado únicamente por átomos de carbono dispuestos en los vértices de un hexágono formando una red hexagonal casi infinita (figura 2); es uno de los primeros materiales bidimensionales descubiertos y posee propiedades físicas y químicas únicas que pueden ser aprovechadas principalmente en el área de la nanotecnología. Algunos de sus atributos son la alta movilidad electrónica, gran conductividad térmica, resistencia mecánica y flexibilidad, incluso mejor que el acero [20], transparencia óptica, entre otros.

El grafeno se considera un material cristalino debido a que podemos formarlo tomando como base una celda unidad y replicarla a lo largo de un plano; estos planos tienen solo un átomo de carbono de espesor, de ahí el nombre de material bidimensional.

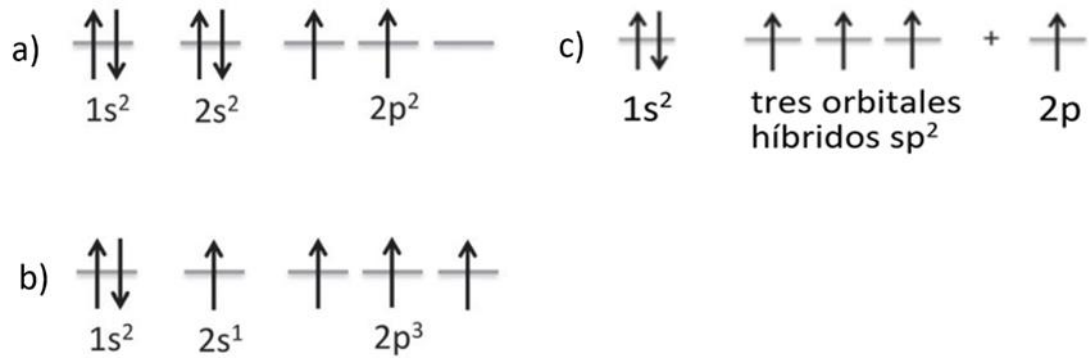
La primera persona en hacer estudios sobre el grafeno fue Philip Russell Wallace quien en 1946 publicó un artículo teórico [7] usando el modelo Tight-Binding y la teoría de bandas en sólidos para explicar las propiedades eléctricas, magnéticas y ópticas del grafito basándose en láminas 2D de grafeno como primera aproximación; predijo ciertos comportamientos extraños en los portadores de carga como una masa efectiva de $1/18$ veces la masa del electrón y una brecha energética nula entre los estados de conducción y de valencia. Posteriormente se desarrollaron varios trabajos mostrando más efectos anómalos en el comportamiento de los portadores de carga en este material [1,10,11], entre los que se encuentran la aparición

de un mínimo de conductividad o la imposibilidad de detener a los portadores de carga por barreras de potencial (paradoja de Klein)

La síntesis de este nanomaterial se realizó por primera vez en 2004 por los científicos Andre Geim y Konstantin Novoselov utilizando la técnica de exfoliación mecánica [3], la cual consiste en colocar un trozo de Grafito pirolítico altamente orientado (HOPG) sobre una cinta “tape” e ir pegando y despegando la cinta para ir separando las láminas de grafito hasta obtener una monocapa de grafeno, recordando que el grafito no es más que láminas de grafeno sobrepuestas unas sobre las otras. Gracias a este y otros trabajos relacionados con materiales 2D les fue otorgado el premio Nobel de Física en 2010. Desde entonces se han descubierto más propiedades mecánicas y electrónicas exóticas en este material, las cuales están íntimamente ligadas a fenómenos cuánticos generados por las interacciones de los electrones con la red, potenciales generados por los átomos de carbono, defectos y a la disposición de la red, incluso la interacción con campos eléctricos y magnéticos externos.

4.2.3 Estructura electrónica del grafeno

Como ya se mencionó el átomo de carbono posee 6 electrones, en su estado basal que es el de menor energía; su configuración electrónica es: C: $1s^2, 2s^2, 2p^2$. Sin embargo, al estar cerca de otros átomos el carbono intenta formar el máximo de enlaces posibles, ya que esto reduce la energía del sistema y lo hace más estable; debido a esto los electrones se reacomodan promoviendo un electrón del orbital $2s$ a un orbital $2p$ y la configuración electrónica entonces sería C: $1s^2, 2s^1, 2p^3$. Este estado se conoce como estado excitado y ahora el átomo de carbono puede formar un máximo de 4 enlaces; en el grafeno se forman 3 enlaces covalentes con otros 3 átomos vecinos. Mezclando sus orbitales atómicos se llega a la formación de 3 orbitales híbridos tipo sp^2 dejando uno de los electrones de valencia en un orbital puro tipo p (casi siempre asignado como p_z); este orbital, al estar orientado en la dirección z estaría perpendicular al plano que forman los orbitales híbridos sp^2 . Un diagrama del proceso se muestra en la figura 1.



Figura

1: a) orbitales atómicos en el estado base del átomo de carbono, b) orbitales atómicos del átomo de carbono en el estado excitado, c) orbitales moleculares híbridos del carbono en el grafeno.

Cada uno de los átomos de carbono que forman al grafeno poseen una hibridación tipo sp^2 , donde 3 de sus 4 electrones de valencia se encuentran en orbitales híbridos tipo sp^2 que se traslapan frontalmente formando enlaces covalentes tipo σ ; el electrón restante se encuentra en el orbital p_z que podemos imaginar como un par de lóbulos perpendiculares al plano (Figura 2); estos orbitales se superponen lateralmente formando enlaces tipo π .

Gracias a los fuertes enlaces σ se obtienen las propiedades mecánicas y elásticas, mientras que los enlaces π dan pie a la mayoría de las propiedades electrónicas y a las fuerzas de Van der Waals que mantienen unidas varias láminas de grafeno en el grafito; sin embargo, éstas son mucho más débiles, de no enlace y permiten el deslizamiento entre los planos y así permitir separarlos fácilmente como es el caso de la exfoliación mecánica.

Podemos imaginar la red del grafeno parecida a la red de un panal de abejas, formada de hexágonos unidos unos a otros y en cada vértice colocar un átomo de carbono (Figura 2 c).

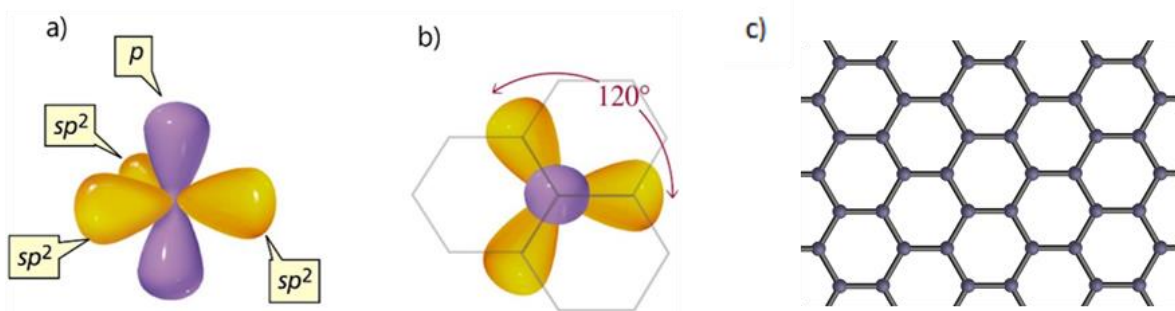


Figura 2: Orbitales híbridos sp^2 y orbitales puros p_z en los átomos de carbono formando grafeno a) vista lateral b) vista del plano c) modelo de esferas y barras de la red casi infinita de grafeno.

Para el análisis podemos descomponer la red de grafeno en dos subredes de Bravais hexagonales sobrepuestas, “A y B”, de modo que cada átomo de la subred A se encuentra enlazado a 3 átomos de la subred B y viceversa (Figura 3).

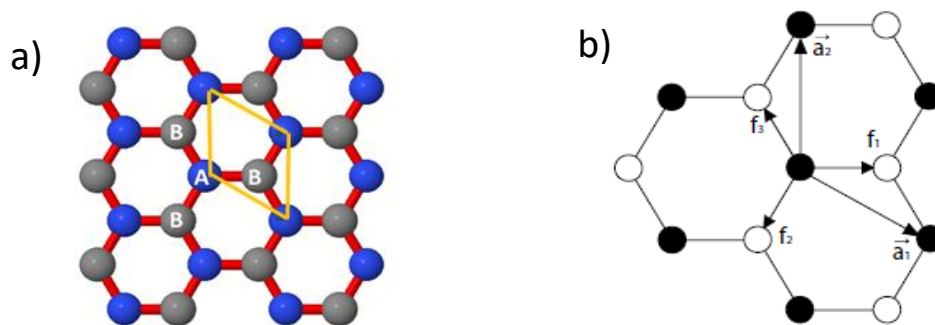


Figura 3: a) Subredes que forman al grafeno, en amarillo se muestra la celda unidad; b) Vectores base de la red de grafeno y vectores que conectan un átomo de carbono con sus 3 primeros vecinos.

Desde el punto de vista teórico y de la física fundamental del sistema distinguir 2 tipos de subred conlleva al concepto de simetría quiral el cual será de utilidad posteriormente para entender la presencia de un par inequivalente de conos de Dirac en los puntos K y K' de la primera zona de Brillouin y un modo cero en los niveles de Landau que aparecen al aplicar un campo magnético intenso en este material [11].

En este material el parámetro de red es de 2.46 \AA ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$), es decir la distancia que hay entre átomos de la misma subred el cual denotaremos por “a” mientras que la distancia del enlace covalente entre carbonos es de 1.42 \AA y la denotaremos por “ a_{c-c} ”.

Como en cualquier material cristalino podemos definir una celda unidad primitiva que contenga toda la información acerca de las simetrías de toda la red (Figura 3); los vectores base \vec{a}_1 y \vec{a}_2 generan la celda unidad primitiva que contiene 2 átomos, uno perteneciente a cada subred.

Los vectores base de la red son:

$$\vec{a}_1 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right) , \quad \vec{a}_2 = a(0,1)$$

Usando estos vectores como base podemos identificar la posición de cualquier átomo de la red dada por $R_l = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$ con m, n siendo números enteros.

Mientras que los vectores que conectan un átomo de carbón con sus tres primeros vecinos más cercanos son:

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

Es importante señalar que una traslación por un vector δ_i que relaciona un sitio de la subred A con un sitio de la subred B no representa una operación de simetría como la que existe en el operador de translación $\hat{T}_{\vec{R}_l}$ en el teorema de Bloch (sección 2.3); es decir, el operador \hat{T}_{δ_i} no conmuta con el Hamiltoniano completo $[\hat{T}_{\delta_i}, H] \neq 0$ por lo que estas subredes deben tratarse de forma independiente.

Tomando los vectores base de la red en el espacio real podemos hallar una red correspondiente en el espacio de momentos también llamado espacio recíproco; la red recíproca resultante también se trata de una red hexagonal (Figura 4); de igual manera necesitamos hallar una celda unidad que contenga toda la información de la red recíproca. Debido a que la celda unidad no es única elegimos la celda de Wigner-Seitz; esta celda unidad primitiva contiene las mismas simetrías de la red real y en el caso del espacio recíproco es llamada primera zona de Brillouin.

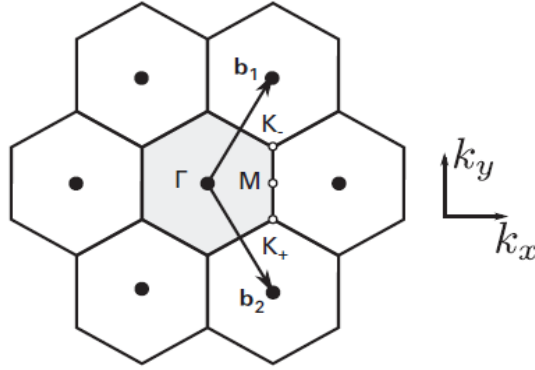


Figura 4: Red recíproca de grafeno, la celda unidad (primera zona de Brillouin) está marcada en gris, b_1 y b_2 representan los vectores base de la red, los puntos de alta simetría Γ , M , K_+ , K_- están indicados dentro de primera zona de Brillouin.

Podemos definir la primera zona de Brillouin en un punto (origen) de la red recíproca como el conjunto de todos los puntos que se alcanzan desde el origen hasta tocar un plano de Bragg, es decir el origen se encuentra en un punto de la red recíproca y sus límites son los planos de Bragg.

Para la red del grafeno los vectores base de la red recíproca son:

$$b_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}) \quad b_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3})$$

En la primera zona de Brillouin del grafeno en el espacio recíproco (Figura 4) podemos identificar 6 vértices de los cuales solo 2 son inequivalentes (K y K') ya que no están relacionados por las simetrías de la red recíproca, se encuentran situados en

$$K = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \quad \text{y} \quad K' = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{2}{\sqrt{3}}, 0\right)$$

también identificamos otros puntos de alta simetría Γ y M que se encuentran en el centro de la zona de Brillouin y entre los puntos K y K' respectivamente, los cuales son útiles para graficar y estudiar la estructura de bandas.

La estructura de bandas permite analizar la relación que existe entre el momento de los electrones y su energía en un material; esta relación debe hacerse en el espacio recíproco y no en el espacio real de la red cristalina. Debido a la naturaleza bidimensional del grafeno los portadores de carga están confinados a moverse en 2 dimensiones, por lo que la tarea de hallar la red recíproca se simplifica.

4.3 Teorema de Bloch

Felix Bloch en 1928 enunció un teorema que imponía ciertas condiciones a la función de onda de los electrones dentro de un sólido cristalino, ayudando a modelar la forma general que debían tener estas funciones de onda para cumplir los requerimientos de la teoría cuántica y de la simetría traslacional del problema; algunos de los modelos para sólidos parten de estas funciones para obtener la estructura de bandas, por lo que es importante que se cumpla al momento de modelar un sólido cristalino.

Sabemos que la ecuación de Schrödinger $\hat{H}\psi = E\psi$ puede ser resuelta para un electrón dentro de un potencial débil y periódico; usando una aproximación de electrón casi libre se obtienen los eigenvalores de energía $\varepsilon_{\vec{k}}$. Si tomamos los valores de energía $\varepsilon_{\vec{k}}$ y los graficamos como función de un nuevo número cuántico \vec{k} llamado vector de onda obtenemos una relación conocida como estructura de bandas electrónica, la cual nos entrega información importante sobre el comportamiento electrónico en un sólido.

Una consecuencia del potencial electrón-ion es que los electrones tienen valores de energías discretos; al analizar el problema como si se tratase de muchos iones y electrones, estos niveles se encuentran tan cerca que forman bandas de energía permitidas, mientras que los estados prohibidos forman brechas de energía, conocidos como “gaps de energía”.

En mecánica cuántica podemos describir una translación por un vector de la red \vec{R}_l por medio de un operador de translación (2.23) que definimos en términos del operador de momento \hat{p} el cual debe ser previamente definido correctamente para el cristal

$$\hat{T}_{\vec{R}_l} = e^{(\frac{i}{\hbar}\hat{p}\cdot\vec{R}_l)} \quad (2.23)$$

Este operador de translación describe una operación de simetría bajo la cual el problema es invariante debido a que conmuta con el Hamiltoniano completo del problema $[\hat{T}_{\vec{R}_l}, \hat{H}] = 0$, por lo tanto, los eigenestados de H son también eigenestados de $\hat{T}_{\vec{R}_l}$ para cualquier vector de la red \vec{R}_l y momento \vec{p} .

Enunciando el teorema: Para cualquier función de onda que satisfaga la ecuación de Schrödinger con un potencial periódico tal que $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R}_l)$, existe un vector \vec{k} tal que la traslación por un vector de la red \vec{R}_l es equivalente a multiplicar por un factor de fase $e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_l}$, es decir

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_l) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_l) \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.24)$$

Alternativamente, podemos ver el teorema como que la función de onda debe cumplir la condición:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

siendo $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ una función con la misma periodicidad de la red y cumple con

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_l).$$

4.4 Modelo Tight-Binding

El modelo de Tight-Binding es un método variacional ampliamente usado en el cálculo de la estructura de bandas electrónicas de materiales cristalinos que se elige por ser simple y por poder permitir aproximaciones más exactas si se incluyen los segundos o terceros vecinos en los cálculos, computacionalmente es poco demandante por lo que se usa en sistemas grandes del orden de miles de átomos por celda unidad.

Este método supone que existe un potencial periódico generado por los átomos o moléculas en cada punto de la red y que coincide con la periodicidad de la red cristalina; este potencial es de corto alcance, y decae rápidamente con la distancia, debido a esto la función de onda atómica tiende a 0 para distancias mayores a la constante de red del material y por lo tanto la integral de traslape entre las funciones de onda localizadas en sitios atómicos diferentes es 0, es decir,

$$\int \phi_i^* \phi_j d\tau = \delta_{ij}.$$

En este modelo imaginamos que las funciones de onda de los átomos se encuentran tan cerca que en ocasiones estas se traslapan. Entonces los electrones más exteriores pueden brincar a otros átomos vecinos, por lo que se propone que la función de onda electrónica se forma a partir de una

combinación lineal de orbitales atómicos (LCAO por sus siglas en inglés) de cada átomo individual centradas en cada sitio atómico.

En la red bidimensional del grafeno los electrones que se encuentran formando los enlaces covalentes en orbitales sp^2 están fuertemente ligados a los átomos de carbono, mientras que los electrones en los orbitales $2p_z$ se encuentran débilmente ligados y pueden moverse entre los sitios de la red; en el modelo de Tight-Binding para el grafeno solo tomaremos en cuenta los orbitales $2p_z$ para describir las bandas π y π^* debido a que el solapamiento entre los orbitales $2p_z$ y cualquiera de los orbitales sp^2 es nulo; para describir el sistema se tendrá en cuenta un electrón por sitio atómico y 2 sitios atómicos (A y B) por celda unitaria. Además, se asume que la interacción entre átomos vecinos es casi nula y se puede despreciar.

Se tendrán en cuenta solo los 3 primeros átomos vecinos más cercanos que se encuentran unidos por los vectores δ_j con ($j = 1, 2, 3$)

Para describir el estado de un electrón en los orbitales $2p_z$ centrados en cada sitio de la red, es decir en cada átomo de carbono, y de acuerdo con el teorema de Bloch (4.3), la función de onda de un electrón en un potencial periódico no depende de las traslaciones por un vector de la red \vec{R}_l y debe ser expresada en forma de una función de Bloch; debido a la distinción hecha para sitios A y B pertenecientes a cada subred las funciones de onda serian:

$$\Phi_A(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\sum_{\vec{R}_A}^N e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{A,l}} \phi_A(\vec{r} - \vec{R}_{A,l}) \right] \quad (2.25)$$

$$\Phi_B(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\sum_{\vec{R}_B}^N e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{B,l}} \phi_B(\vec{r} - \vec{R}_{B,l}) \right] \quad (2.26)$$

Este conjunto de funciones es llamado funciones base variacionales lineales. La suma va desde \vec{R} que denota las posiciones del átomo en la celda unitaria, hasta N, el número de sitios atómicos en el cristal ($N \sim 10^{24}$) ($l = 1, 2, \dots, N$), ϕ_A y ϕ_B representan el orbital atómico $2p_z$ centrado en cada punto de la subred correspondiente. De igual manera $\vec{R}_{A,l}$ y $\vec{R}_{B,l}$ son vectores pertenecientes a cada subred de la l -ésima celda unidad.

La función de onda electrónica para los orbitales π es una combinación lineal de (2.25) y (2.26) que se escribe de la siguiente manera:

$$\psi_{\pi}(\vec{k}, \vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_{A,l}) \Phi_A(\vec{k}, \vec{r}) + \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_{B,l}) \Phi_B(\vec{k}, \vec{r}) . \quad (2.27)$$

De acuerdo con el método, la energía variacional está dada por:

$$E_j = \frac{\langle \psi_j | H | \psi_j \rangle}{\langle \psi_j | \psi_j \rangle} = \frac{\sum_{i,j}^{N,N} a_i^* a_j H_{ij}}{\sum_{i,j}^{N,N} a_i^* a_j S_{ij}} \quad (2.28)$$

siendo $a_i^* a_j$ coeficientes a determinar; el hamiltoniano $H_{i,l}$ y la matriz de solapamiento S_{il} están definidas por:

$$H_{i,l} = \langle \phi_i | H | \phi_l \rangle$$

$$S_{il} = \langle \phi_i | \phi_l \rangle$$

Los coeficientes $a_i^* a_j$ son aquellos que minimizan la energía variacional.

$$\frac{\partial E}{\partial a_i} = 0 \quad a_i^* = 0$$

Por lo tanto, reescribimos la ecuación de Schrödinger como:

$$H_{ij} a_j = E_j a_j S_{ij}$$

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = E_j \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

Esta es una ecuación de grado n donde sus soluciones son los n eigenvalores, bandas de energía o relaciones de dispersión; en el caso de grafeno existen 2 orbitales por celda unidad; entonces n=2, H y S tienen 4 componentes cada una.

Para un valor de k dado podemos hallar la i-ésima energía o eigenvalor $E_i(k)$ (i=1, ..., n) resolviendo la ecuación:

$$\det |\mathbf{H} - E_i(k)\mathbf{S}| = 0 \quad (2.29)$$

Aquí \mathbf{H} y \mathbf{S} son las matrices de transferencia y solapamiento respectivamente y sus componentes están dados por:

$$H_{AA} = \frac{1}{N} \sum_{R_{A,i}}^N \sum_{R_{A,j}}^N e^{ik \cdot (R_{A,j} - R_{A,i})} \langle \phi_A(\mathbf{r} - R_{A,i}) | H | \phi_A(\mathbf{r} - R_{A,j}) \rangle$$

$$H_{AA} = \frac{1}{N} \sum_{R_{A,i}=R_{A,j}}^N \varepsilon_{2pz} = 0 = H_{BB}$$

Donde ε_{2p} es el valor de energía del orbital $2p_z$; este valor es distinto de 0 sin embargo, lo tomaremos de esta manera como el valor de referencia.

$$H_{AB} = \frac{1}{N} \sum_{R_{A,i}}^N \sum_{R_{B,i}}^N e^{ik \cdot (R_B - R_A)} \langle \phi_A(r - R_{A,i}) | H | \phi_B(r - R_{B,i}) \rangle$$

$$H_{AB} = \frac{1}{N} \sum_{R_{A,i}}^N \sum_{R_{B,i}}^N e^{ik \cdot (R_B - R_A)} - \gamma_0$$

$$H_{AB} = \frac{\gamma_0}{N} \sum_{R_{A,i}}^N \sum_{j=1}^3 e^{ik \cdot \delta_j} = -\gamma_0 f(k)$$

De manera análoga se halla $H_{AB} = H_{BA}^*$

El valor γ_0 es conocido como integral de salto y tiene un valor hallado experimentalmente de:

$$\gamma_0 = -\langle \phi_A(r - R_A) | H | \phi_B(r - R_B) \rangle = 3.033eV$$

$f(k)$ Se obtiene realizando una suma con los vectores δ_j que unen un átomo con sus 3 primeros vecinos

$$f(k) = \sum_{j=1}^3 e^{ik \cdot \delta_j} = e^{i \frac{k_y}{\sqrt{3}}} + 2 e^{-i \frac{k_y}{2\sqrt{3}}} \cos\left(\frac{k_x}{2}\right)$$

Las componentes de la integral de traslape S están dados por:

$$S_{AA} = \frac{1}{N} \sum_{R_{A,i}}^N e^{ik \cdot (R_A - R_A)} \langle \phi_A(r - R_{A,i}) | \phi_A(r - R_{A,i}) \rangle = 1 = S_{BB}$$

$$S_{AB} = S_0 f(k) = S_{BA}^*$$

con $S_0 = 0.129$

Al sustituir estos valores en (2.29) obtenemos

$$\det \begin{pmatrix} -E & -\gamma_0 - ES_0f \\ -\gamma_0 - ES_0f^* & -E \end{pmatrix}$$

de donde se obtiene la relación de dispersión siguiente (autoenergias):

$$E(\vec{k}) = \pm \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_x\right) \cos\left(\frac{k_y}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_y}{2}\right)} \quad (2.30)$$

Esta última ecuación es conocida como relación de dispersión para las bandas π y π^* , \pm nos indica la banda de conducción y valencia respectivamente; aquí el nivel de Fermi se encuentra justo en donde la banda de conducción y valencia se tocan (Figura 5), en el llamado punto de Dirac; por conveniencia tomaremos el 0 de energía donde se encuentra el nivel de Fermi. Además, en la vecindad de los puntos K_+ y K_- podemos hacer una aproximación lineal de la relación de dispersión de la forma

$$E \pm(\vec{k}) = \pm v_F |\vec{\kappa}| \quad (2.31)$$

Donde $\vec{\kappa}$ es un vector relativo medido desde K_+ o K_- , es decir $\kappa = k - K$ y v_F la velocidad de Fermi dada por $\frac{3ta}{2} \approx 1 \times 10^6$ m / s .

La simetría electrón-hueco que poseen las bandas (Figura 6) debido a la ecuación (2.30) muestra que es simétrica en la energía para estados sobre y debajo de los puntos de Dirac.

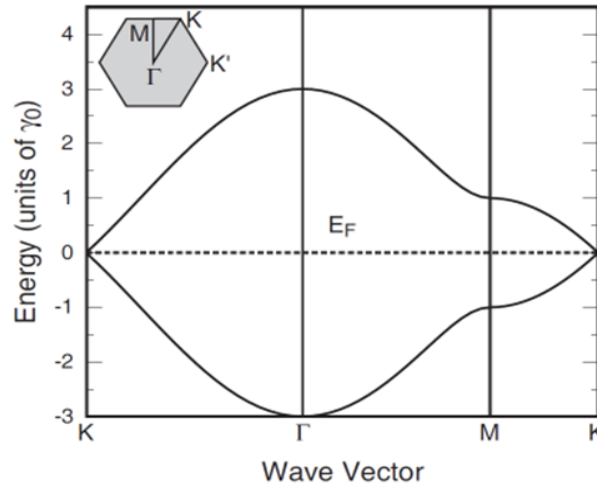


Figura 5: Estructura de las bandas π y π^* del grafeno obtenida por el modelo tight binding a primeros vecinos, el nivel de Fermi se muestra con una línea punteada en $E=0$

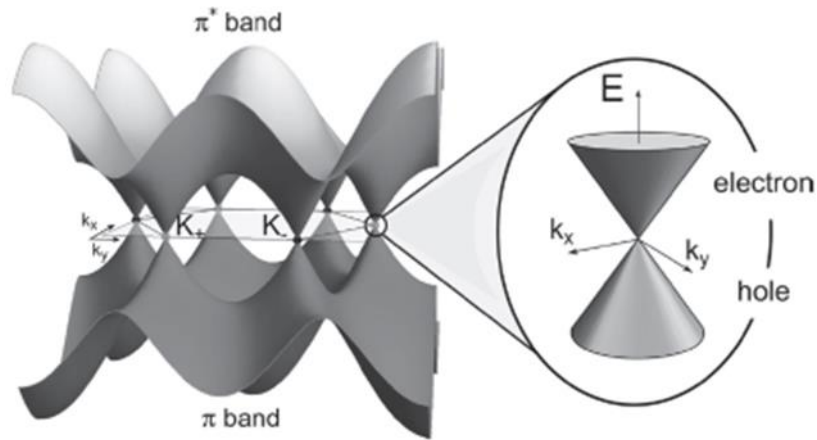


Figura 6: bandas electrónicas π y π^* graficadas como función del vector de onda \vec{k} dentro de la primera zona de Brillouin, se destaca la relación de dispersión lineal cerca de K_+ , K_-

4.5 Ecuación de Dirac en grafeno cerca los puntos de Dirac

Sabemos que en los materiales en estado sólido los electrones se comportan distinto a como lo hacen normalmente en el vacío o en un átomo aislado; esto es debido a los potenciales generados por los núcleos atómicos, al movimiento colectivo del resto de electrones y su interacción con ellos, en el caso de los cristales, el tipo de estructura cristalina, las vibraciones colectivas en la red (fonones), entre otros factores.

Esto provoca que se puedan dan gran cantidad de fenómenos asociados a estos parámetros y se exhiban propiedades interesantes tanto desde el punto de vista teórico como desde las posibles aplicaciones cuando se logra entender y modular a conveniencia estos fenómenos.

El caso del grafeno es de especial interés debido a que en este nanomaterial los electrones se comportan como partículas sin masa y la estructura de bandas cerca de los puntos de Dirac presenta una relación energía-momento lineal, característica de partículas relativistas; la forma matemática de la ecuación (ecuaciones de Weyl) que rige el comportamiento de los portadores de carga nos recuerda a otro tipo de partículas llamadas neutrinos. Ambos siguen la misma relación energía-momento y son equivalentes en cierto sentido.

Si centramos el análisis del espectro de energía (estatura de bandas) de los electrones y huecos en grafeno en el rango lineal cerca de K_+ y K_- podemos hacer uso de la ecuación de Dirac para partículas sin masa para describir a los portadores de carga; de este modo se pueden hacer importantes observaciones acerca de su comportamiento y de los efectos cuántico-relativistas que presentan. Entre los efectos más relevantes reportados en la literatura podemos encontrar el efecto Hall cuántico fraccionario [8], transporte de spin [9,10], efecto túnel de Klein, entre otros.

En el grafeno, la estructura de bandas a baja energía está regida por la aproximación de masa efectiva igual a 0; de este modo simplificamos el hamiltoniano del modelo Tight Binding por un hamiltoniano efectivo en la vecindad de K_+ y K_- , respectivamente.

$$\hat{H}_{K_+} = \hbar v_f \vec{\sigma} \cdot (-i\vec{\nabla})$$

Esta ecuación tiene la misma forma que las ecuaciones de Weyl (2.17, 2.18) con la diferencia que la velocidad de Fermi sustituye a c , la velocidad de la luz, y su espectro de energía esta dado por

$$E(\kappa) = \pm v_f |\vec{\kappa}|$$

Para el espectro de energía en K_- la situación es similar siendo $\vec{\sigma}$ el complejo conjugado de $\vec{\sigma}$

$$\hat{H}_{K_-} = \hbar v_f \vec{\sigma} \cdot (-i\vec{\nabla})$$

En el grafeno la orientación del pseudospin es el análogo del spin real y está relacionada al vector $\vec{\kappa}$, la estructura de bandas en el punto K_+ describe Fermiones de Dirac derechos, el signo positivo corresponde al cono superior con pseudospin paralelo a la dirección de propagación, mientras que el signo negativo describe antipartículas (huecos) en la parte inferior de los conos con el pseudospin apuntando en dirección antiparalela a la propagación de la partícula. Similarmente en el punto K_- describimos Fermiones de Dirac izquierdos, pero ahora con quiralidad opuesta al caso de K_+ (Figura 7).

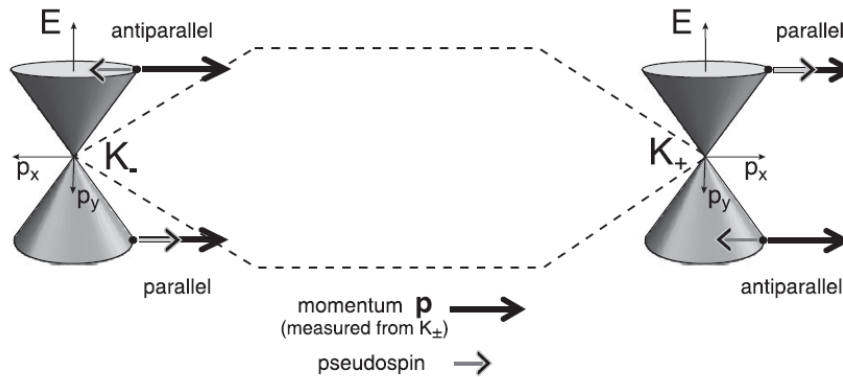


Figura 7: Conos de Dirac en dos puntos inequivalentes K y K_+ , se muestra el pseudospin paralelo y antiparalelo para una misma banda que cruza el nivel de Fermi.

4.6 El Neutrino

El neutrino fue propuesto en 1930 por Wolfgang Pauli para explicar la no conservación de la energía y el momento lineal en la desintegración beta, ya que parecía haber energía “perdida”; en este proceso un neutrón se transforma en un protón emitiendo un antineutrino y un electrón; un ejemplo de este proceso se puede observar en la desintegración del tritio en helio (${}^3\text{H} \rightarrow {}^3\text{He}$).

En años posteriores se descubrieron otros procesos como el decaimiento del pion en un muon [13], donde teóricamente también intervenía un neutrino; sin embargo, no existía evidencia experimental de su existencia. Solo se sabía que interactuaban muy débilmente con la materia y para confirmar experimentalmente su existencia se necesitaba una fuente que emitiera un gran flujo de estas partículas que, además, no poseen carga eléctrica.

En 1956 Clyde Cowan y Frederick Reines diseñaron un experimento cerca de la planta nuclear de Savannah River, en California E.U para la detección de los neutrinos; esta planta nuclear producía un gran flujo de antineutrinos y hacía factible la detección. El experimento consistía en grandes tanques de agua con cloruro de cadmio CdCl_2 donde se esperaba que el gran flujo de antineutrinos producidos por la planta nuclear interactuara para observar el proceso “inverso” al decaimiento beta, $\bar{\nu} + p^+ \rightarrow n + e^+$ detectando fotones como producto final. El objetivo era que alguno de los antineutrinos interactuara con un protón de los núcleos de cadmio, produciendo un

positrón el cual se aniquilaría con un electrón emitiendo un fotón que se podía detectar [13]; en 1995 Reines obtuvo el premio Nobel por la confirmación experimental de la existencia del neutrino.

La violación de la paridad fue un problema que comenzó con los experimentos realizados con el kaón K^+ , que decae en 2 modos distintos generando en uno de ellos 2 piones y en el otro, 3 piones; midiendo las propiedades de spin, masa y carga de las partículas al final del proceso se llegó a la conclusión de que se trataba de la misma partícula, lo cual era imposible si la paridad era conservada en las interacciones débiles.

En 1956 T.D. Lee y C.N. Yang observaron la violación de la paridad [14] durante el decaimiento beta en un isotopo polarizado de cobalto ^{60}Co , confirmando que existían procesos donde no se cumplía. La paridad es una de las 3 simetrías discretas usadas actualmente en el modelo estándar de la física de partículas y por lo tanto el hecho de no cumplirse presentaba consecuencias importantes en la teoría usada en ese momento; esto fue simplificado al proponerse la teoría V-A para las interacciones débiles, propuesta en 1958 por R.P. Feynman y M. Gell-Mann [15].

El neutrino es una partícula elemental que se comporta muy diferente al resto de las partículas conocidas dentro del modelo estándar [24]. En la naturaleza todas las partículas presentan ambas quiralidades menos los neutrinos y antineutrinos que siempre aparecen únicamente en una de estas dos quiralidades.

En la sección (4.1.3) vimos que es posible describir una partícula de spin $\frac{1}{2} \hbar$ sin masa mediante un par de ecuaciones llamadas ecuaciones de Weyl, con la peculiaridad de que solo es necesario usar una de estas ecuaciones para describir a cada una de estas partículas, una para el neutrino y otra de para el antineutrino. Experimentalmente se sabe que el neutrino siempre presenta helicidad negativa o izquierda, esto significa que el spin apunta en dirección antiparalela a la dirección del momento, mientras que el antineutrino siempre presenta helicidad positiva o derecha, es decir, el spin y el momento apuntan en la misma dirección; esta propiedad intrínseca de estas partículas diferencia a los neutrinos de los antineutrinos (Figura 8).

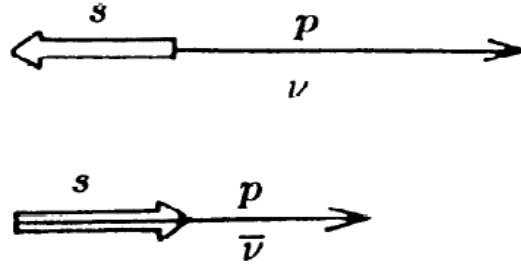


Figura 8: quiralidad del neutrino ν y el antineutrino $\bar{\nu}$

4.7 Fermiones de Dirac sin masa

En grafeno las excitaciones de baja energía que suceden cerca del nivel de Fermi cumplen una relación de dispersión lineal entre la energía y el momento que nos permite usar el hamiltoniano que describe Fermiones de Dirac sin masa

$$\hat{H} = -i\hbar v_f \vec{\sigma} \cdot \vec{p}$$

donde v_f representa la velocidad de fermi, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ son las matrices de Pauli y $\vec{p} = (p_x, p_y)$ el momento en 2 dimensiones; esta descripción es teóricamente correcta e incluso puesta a prueba experimentalmente [16].

El hecho de tener este tipo especial de espectro de energía está originado por la estructura cristalina del material, y por las dos subredes triangulares que lo forman; que son equivalentes entre si al hacer una transformación de paridad, y forman un par de bandas que se cruzan justamente en el punto de carga neutral y en el borde de la primera zona de Brillouin. En consecuencia, las cuasipartículas en este espectro de energía en forma de cono cumplen con $E = \hbar k v_f$ como si fueran partículas sin masa y momento k ; esto hace que las propiedades de transporte electrónico difieran de los metales o semimetales convencionales, donde la relación de dispersión es parabólica en lugar de lineal.

Este espectro, además de ser lineal, es simétrico respecto a la banda de conducción y de valencia; el nivel de Fermi al residir justo en donde se tocan estos conos, hace que podamos hacer una analogía con el concepto de vacío cuántico; esto se debe a que la banda de valencia se encuentre totalmente llena y la banda de conducción totalmente vacía, de este modo un electrón

que sea promovido a la banda de conducción deja un “hueco” en la banda de valencia con la misma energía del electrón promovido. Esta analogía con la creación en pares partícula-antipartícula nos permite estudiar efectos conocidos en electrodinámica cuántica (QED) como es el caso del efecto túnel de Klein que ya han sido estudiados experimentalmente [17].

En grafeno es posible estudiar también la simetría de conjugación de carga debido a que los estados que describen electrones y huecos están relacionados por las ecuaciones de Weyl, funciones de onda de dos componentes, necesarias para describir las contribuciones de cada subred A y B. La descripción de dos componentes en grafeno es similar a la usada en QED en los espinores de Weyl, aquí el papel del spin está remplazado por cada subred, razón por la que en este material se le llama pseudospin.

Existen otras analogías con QED en este material que vale la pena mencionar; los conos en el espectro de energía derivan de la intersección de 2 bandas, cada una correspondiente a una subred, notamos que estas bandas cruzan el nivel de Fermi pasando desde los estados de conducción a los de valencia, un electrón con energía E propagándose en dirección positiva se origina de la misma banda que un hueco con energía $-E$ propagándose en dirección opuesta, con el mismo valor de pseudospin; esto nos hace ver que para estados debajo del nivel de Fermi se tiene un valor de helicidad y el valor opuesto por encima del nivel de Fermi (Figura 8). De este modo podemos introducir el concepto de quiralidad en grafeno formalmente definido como la proyección del spin en dirección del momento que es positiva y negativa para electrones y huecos correspondientemente.

4.8 Resultados y discusión

Hemos hallado que la descripción de las excitaciones electrónicas cerca del nivel de Fermi es congruente con la teoría cuántico-relativista y es adecuado el uso de las ecuaciones de Weyl en este sistema; encontrando aspectos que debemos interpretar de una manera similar a como se interpretan en la física de partículas, un ejemplo de esto es el spin, que es remplazado por el pseudospin en el grafeno; el concepto de quiralidad es otro análogo que podemos hallar, mientras que en el neutrino esta propiedad nos permite diferenciar al neutrino del antineutrino en el grafeno la quiralidad nos describe a cada una de las 2 bandas que forman a al par de conos de Dirac inequivalentes que aparecen en la estructura de bandas, esta propiedad hace del grafeno un material especial en comparación con otros semiconductores o conductores convencionales.

Del mismo modo que se usó el conocimiento existente en al área de la física de partículas para describir correctamente un nanomaterial, el estudio de este y otros materiales novedosos puede ser usado para comprender aspectos de la física de partículas, en específico incógnitas respecto a la naturaleza de los neutrinos por medio de cuasipartículas o estados exóticos en estos materiales, un ejemplo son los semimetales de Weyl que es una familia de materiales donde emergen estados descritos por este par de ecuaciones.

5 CONCLUSIONES

A lo largo de este trabajo se estudió el formalismo de las ecuaciones de Dirac y Weyl en el caso general, se describieron dos sistemas equivalentes desde el punto de vista teórico y se logran comparar conceptos aplicados de la electrodinámica cuántica a un sistema nanométrico, y a uno en la física de partículas como son los neutrinos.

Es de vital importancia poder utilizar los conceptos existentes en QED como la quiralidad en la descripción del grafeno, entendiendo a este nanomaterial como una plataforma para poder poner en práctica conceptos de física cuántico-relativista y sus consecuencias no triviales, en el transporte electrónico y en las propiedades fundamentales del sistema.

El estudio de sistemas a la nanoescala que comparten características con las partículas elementales abre la posibilidad de estudiar características de estas a bajas energías lo que nos permite hallar propiedades fundamentales como puede ser la inexistencia de neutrinos con diferente quiralidad y la violación de la paridad.

Por último, es relevante desde el punto de vista tecnológico entender los fenómenos fundamentales y su origen en los nuevos materiales para el diseño de aplicaciones relacionadas con el control de spin, polarización y transporte quiral en nanoestructuras; entender y controlar estos fenómenos nos permitirá diseñar dispositivos capaces de manejar información cuántica hasta ahora ignorada y que puede ser aplicada en dispositivos sin disipación energética, espintrónicos y de información cuántica.

6 REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Novoselov, K., Geim, A., Morozov, S. et al. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature* 438, 197–200 (2005).
- [2] N. Tajim, S. Sugawara, M. Tamura et al. Transport properties of massless Dirac fermions in an organic conductor α -(BEDT-TTF)₂I₃ under pressure. *EPL* . vol 80, 47002 (2007)
- [3] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, A. K. Geim Two-dimensional atomic crystals. *PNAS* vol. 102 no. 30, 10453
- [4] C. Athanassopoulos et al. Results on $\nu_{\mu} \rightarrow \nu_e$ Neutrino Oscillations from the LSND Experiment (LSND Collaboration) *Phys. Rev. Lett.* 81, 1774. (1998)
- [5] REINES, F., COWANjun., C. The Neutrino. *The Neutrino. Nature* 178, 446–449 (1956).
- [6] Feng, B., Sugino, O., Liu, R.-Y., Zhang, J., Yukawa, R., Kawamura, M., Matsuda, I. Dirac Fermions in Borophene. *Physical Review Letters*, 118(9). (2017).
- [7] P. R. Wallace. The Band Theory of Graphite. *Physical Review*, 71(9). (1946).
- [8] Zheng, Y., & Ando, T. Hall conductivity of a two-dimensional graphite system. *Physical Review B*, 65(24). (2002)
- [9] Ohishi, M., Shiraishi, M., Nouchi, R., Nozaki, T., Shinjo, T., & Suzuki, Y. Spin Injection into a Graphene Thin Film at Room Temperature. *Japanese Journal of Applied Physics*, 46(No. 25), L605–L607. (2007)
- [10] Tombros, N., Jozsa, C., Popinciuc, M., Jonkman, H. T., & van Wees, B. J. Electronic spin transport and spin precession in single graphene layers at room temperature. *Nature*, 448(7153), 571–574. (2007).
- [11] Guinea, F., Castro Neto, A. H., & Peres, N. M. R. Electronic states and Landau levels in graphene stacks. *Physical Review B*, 73(24). (2006).
- [12] Castro Neto, A. H., Guinea, F., Peres, N. M. R., Novoselov, K. S., & Geim, A. K. The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, 81(1), 109–162. (2009).
- [13] Pontecorvo, B.(1947) Nuclear Capture of Mesons and the Meson Decay, *Physical Review*. 72, 246.
- [14] C. S. Wu, E. Ambler, R. W. Hayward, D. D. Hoppes, and R. P. Hudson, Experimental Test of Parity Conservation in Beta Decay, *Phys. Rev.* 105, 1413
- [15] R. P. Feynman and M. Gell-Mann, Theory of the Fermi Interaction, *Phys. Rev.* 109, 193

- [16] Zhang, Y., Tan, Y. W., Stormer, H. L. & Kim, P. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene. *Nature* 438, 201–204 (2005).
- [17] M. I., Novoselov, K. S., & Geim, A. K. (2006). Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene. *Nature Physics*, 2(9), 620–625. doi:10.1038/nphys384
- [18] Bolotin, K., Ghahari, F., Shulman, M. et al. Observation of the fractional quantum Hall effect in graphene. *Nature* 462, 196–199 (2009).
- [19] Arne Laucht, Frank Hohls, Niels Ubbelohde. Roadmap on quantum nanotechnologies Arne Laucht et al 2021 *Nanotechnology* 32 162003
- [20] Geim, A., Novoselov, K. The rise of graphene. *Nature Mater* 6, 183–191 (2007).
- [21] Aaron Bostwick. Symmetry breaking in few layer graphene films. *New J. Phys.* 9 385 (2007)
- [22] Chaoyu Chen. Electronic structure of polycrystalline CVD-graphene revealed by Nano-ARPES. *J. Phys.: Conf. Ser.* 849 012019
- [23] IUPAC. *Compendium of Chemical Terminology*, 2nd ed. (the "Gold Book"). Compiled by A. D. McNaught and A. Wilkinson. Blackwell Scientific Publications, Oxford (1997).
- [24] Mary K. Gaillard, Paul D. Grannis, and Frank J. Sciulli. The standard model of particle physics. *Rev. Mod. Phys.* 71, S96 (1999)