



Universidad Autónoma de Baja California
Facultad de Ciencias

**Estructura Electrónica de Bandas en Nanocintas de Grafeno
con Distorsión Kekulé**

Tesis profesional
que para obtener el título de

Físico

presenta:

Elías Andrade Amezcua

Director de Tesis:
Dr. Ramón Carrillo Bastos
FC-UABC

Codirector de Tesis:
Dr. Francisco Mireles Higuera
CNyN-UNAM

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE BAJA CALIFORNIA

FACULTAD DE CIENCIAS

**ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE BANDAS EN NANOCINTAS DE
GRAFENO CON DISTORSIÓN KEKULÉ**

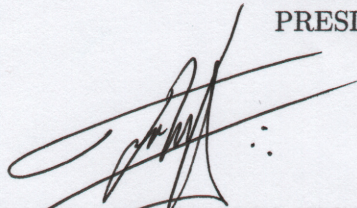
TESIS PROFESIONAL
QUE PRESENTA

ELÍAS ANDRADE AMEZCUA

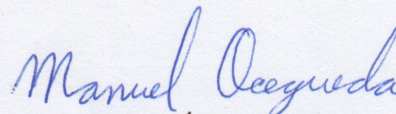
APROBADO POR:



DR. RAMON CARRILLO BASTOS
PRESIDENTE DEL JURADO



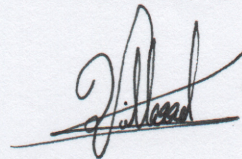
DR. FRANCISCO MIRELES HIGUERA
CODIRECTOR



DR. MANUEL IVÁN OCEGUEDA
MIRAMONTES
SECRETARIO



DR. ERNESTO COTA ARAIZA
PRIMER VOCAL

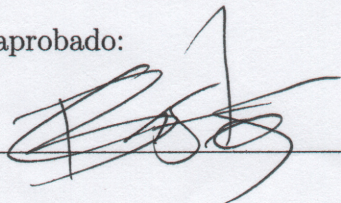


DR. RUBÉN CESAR VILLARREAL
SANCHEZ
SEGUNDO VOCAL

Resumen de la tesis de **Elías Andrade Amezcua** presentada como requisito parcial para la obtención de la **Licenciatura en Física**. Ensenada, Baja California, Mexico, junio del 2018.

Estructura electrónica de bandas en nanocintas de grafeno con distorsión Kekulé

Resumen aprobado:



Dr. Ramon Carrillo Bastos

Una propuesta para abrir un gap en grafeno es la distorsión Kekulé, que consiste en colocar átomos de distintos elementos en la superficie de grafeno, estos átomos alteran la transmisión de los electrones de la banda π del grafeno, resultando en una variación entre enlaces fuertes y débiles que depende de la geometría en la que se coloquen los átomos adsorbidos.

Con la implementación de rutinas desarrolladas en fortran y python obtenemos las estructuras electrónicas de bandas para nanocintas de grafeno con textura Kek-O y Kek-Y considerando cortes tipo zigzag y *armchair* para cada caso. Nuestros resultados más relevantes muestran la aparición de un par de gaps en el caso de nanocintas zigzag con textura Kek-Y, los cuales caracterizamos analíticamente realizando una aproximación a bajas energías, de esta manera puede observarse de manera explícita la dependencia del tamaño de estos gaps respecto a la intensidad de la distorsión y el ancho de la nanocinta.

Palabras claves: **Grafeno, kekulé, estructura de bandas, nanocintas**

Índice

1. Introducción	7
2. Marco teórico	10
2.1. Grafeno	10
2.2. Estructura cristalina del grafeno	12
2.3. Red recíproca	14
2.4. Estructura electrónica de bandas	15
2.5. Nanocintas de grafeno	19
2.5.1. Nanocintas zigzag	20
2.5.2. Nanocintas <i>armchair</i>	22
3. Antecedentes	24
4. Distorsión Kekulé	27
4.1. Nueva zona de Brillouin	27
4.2. Distorsión Kekulé en la aproximación de amarre fuerte	29
4.3. Aproximación a bajas energías	31
4.4. Acoplamiento valle-momento	33
5. Resultados y discusiones	34
5.1. Estructura de bandas de grafeno con distorsión Kekulé	34
5.2. Nanocintas con distorsión Kekulé	37
5.2.1. Nanocintas <i>armchair</i> con distorsión Kekulé	37
5.2.2. Nanocintas zigzag con distorsión Kekulé	39
6. Conclusiones	48
Appendices	49

A. Cálculo analítico del tamaño del gap dentro de la aproximación de bajas energías	49
B. Ejemplo del cálculo de estructura de bandas utilizando el paquete kwant para python	57

Índice de figuras

1.	Alótropos del carbono	10
2.	Estructura cristalina del grafeno	13
3.	Celda primitiva del grafeno	14
4.	Zona de Brillouin del grafeno	15
5.	Propiedades electrónicas de los materiales de acuerdo a su estructura de bandas	16
6.	Relacion de dispersión de grafeno	18
7.	Direcciones principales de corte de nanocintas	19
8.	Celda primitiva de nanocintas zigzag	21
9.	Estructura de bandas de nanocinta zigzag	21
10.	Celda primitiva de nanocintas <i>armchair</i>	22
11.	Estructuras de bandas de nanocintas <i>armchair</i>	23
12.	Distorsión Kekulé	24
13.	Textura Kek-Y observada experimentalmente	26
14.	Texturas Kekulé	27
15.	Nueva celda primitiva aumentada	28
16.	Nueva zona de Brillouin doblada	29
17.	Estructura de bandas de grafeno infinito en la nueva zona de Brillouin	34
18.	Degeneración en los valles	35
19.	Estructura de bandas de grafeno infinito con textura Kek-O	36
20.	Estructura de bandas de grafeno infinito con textura Kek-Y	36
21.	Celda primitiva para nanocintas <i>armchair</i> con textura Kek-O	37
22.	Celda primitiva para nanocintas <i>armchair</i> con textura Kek-Y	38
23.	Estructura de bandas de nanocintas <i>armchair</i> con textura Kek-O	38
24.	Estructura de bandas de nanocintas <i>armchair</i> con textura Kek-Y	39
25.	Celda primitiva para nanocintas zigzag con textura Kek-O	40

26.	Estructura de bandas de una nanocinta zigzag de grafeno prístino en la zona de Brillouin reducida	40
27.	Doblez de la estructura de bandas para nanocintas zigzag	41
28.	Estructura de bandas de nanocinta zigzag con textura Kek-O	42
29.	Celda primitiva para nanocintas zigzag con textura Kek-Y	43
30.	Estructura de bandas de nanocintas zigzag con textura Kek-Y	43
31.	Conductancia en función de la energía para nanocinta zigzag con textura Kek-Y	44
32.	Tamaño del gap en función del ancho de la nanocinta	45
33.	Tamaño del gap en función de amplitud de acoplamiento Kekulé	45
34.	Comparación del resultado analítico y resultado numérico del tamaño del gap en función de la amplitud de acoplamiento Kekulé	46
35.	Comparación del resultado analítico y resultado numérico del tamaño del gap en función del ancho de la nanocinta	47
36.	Condiciones de frontera para nanocintas zigzag	54
37.	Código escrito en python para la estructura de bandas de las nanocintas zigzag con textura Kek-Y	57
38.	Salida del código para nanocinta zigzag con textura Kek-Y realizado en python con el paquete kwant	58

Agradecimientos

Realizar este trabajo de tesis no hubiera sido posible sin la guía de mi director el Dr. Ramón Carrillo Bastos, quien me ha enseñado todo lo que se respecto a transporte electrónico y me ha dedicado tiempo para resolver mis dudas aun cuando el estuviera ocupado, además de siempre aconsejarme en cuestiones académicas y ayudarme cuando lo necesitara, por esto y más le estoy sumamente agradecido.

También agradezco a mi codirector el Dr. Francisco Mireles Higuera por su apoyo en la realización de este trabajo, a través de sus comentarios e ideas que fueron de gran utilidad y brindar la motivación para agregar la parte analítica de este trabajo. Además agradezco al Dr. Pierre A. Pantaleón por su ayuda en la solución del cálculo analítico.

Y por último pero no menos importante, quiero agradecer a mis padres, los cuales siempre me han apoyado en todos los sentidos y me han dado la oportunidad de realizar mi carrera profesional en lo que realmente me apasiona, gracias papá, gracias mamá, los amo.

1. Introducción

El carbono es uno de los elementos químicos más fascinantes; es el elemento base de toda la química orgánica, y por tanto, indispensable para la existencia de la vida. A lo largo de la historia sus alótropos han sido empleados para los más diversos propósitos: el grafito se usa de manera cotidiana al escribir con un lápiz, y a la vez, sirve como escudo protector en reactores nucleares; el diamante es considerado una piedra preciosa y debido a su dureza es utilizado como herramienta de corte y perforación, el carbono incluso forma parte de la aleación del acero, la cual cambió el mundo durante la revolución industrial. Hoy en día se busca que el carbono sea el protagonista en otra revolución, la de la industria de los dispositivos electrónicos.

El grafeno, es un alótropo del carbono conocido por sus peculiares propiedades, principalmente electrónicas (Neto et al., 2009), sus electrones se mueven como partículas relativistas sin masa, conocidos como fermiones de Dirac. Esto le da al grafeno una alta densidad de corriente incluso a temperatura ambiente (Geim, 2009), por lo que el grafeno es una fantástica plataforma para el diseño de dispositivos electrónicos de alta velocidad como transistores, memorias y sensores, entre otras cosas.

Sin embargo, existe un factor que limita el uso de grafeno en estos dispositivos convencionales. Los semiconductores usuales como silicio y germanio tienen un pequeño rango de energías en el que no permiten el paso de corriente, se puede utilizar un campo eléctrico para modificar el nivel de la energía en el material y así controlar cuando se tiene corriente y cuando no, utilizar estos dos posibles estados binarios como 1s y 0s es el principio básico de los transistores para desarrollar los dispositivos

electrónicos. El problema con el grafeno es que este es un material semi-metálico que conduce a cualquier energía, por lo que constantemente se busca la manera mas efectiva de inducir pequeñas regiones de energías prohibidas para poder aprovechar sus otras propiedades. Para lograr esto se han propuesto distintos métodos, como dopar el grafeno con impurezas, aplicar un esfuerzo sobre el, colocarlo sobre sustratos, formar sistemas híbridos, a través de acoplamiento espín-órbita, etc. Entre estas esta la propuesta de Chamon (2000), que consiste en la distorsión periódica de la fuerza de los enlaces de los electrones de la banda π del grafeno, esta distorsión es conocida como distorsión Kekulé por crear patrones similares a los de los anillos de benceno.

Debido a las dimensiones de los dispositivos electrónicos actuales, es necesario tomar en cuenta los efectos en el transporte electrónico provenientes de los bordes del grafeno, los cuales pueden cambiar de manera drástica dependiendo del tipo de corte que se tenga, siendo el corte zigzag y el *armchair* los mas comunes. Estos sistemas semi-infinitos son conocidos como nanocintas de grafeno.

En el presente trabajo de tesis se estudia las implicaciones que tiene la distorsión Kekulé y como cambian las propiedades adquiridas de acuerdo al patrón que forma la distorsión, tanto para grafeno infinito como nanocintas. La razón por la cual éste es un candidato prometedor es debido a que trabajos recientes lograron crear de manera experimental esta textura de enlaces colocando átomos adsorbidos sobre la superficie de grafeno, además de ser atractivo por su robustez a temperatura ambiente y condiciones atmosféricas (Gutiérrez et al., 2016).

En el siguiente capítulo se muestran las bases de la teoría de sólidos del grafeno, como las simetrías de su estructura cristalina y su red recíproca, además una

introducción a la teoría electrónica de bandas y a las nanocintas de grafeno. Posteriormente se mencionan los trabajos mas relevantes donde se ha estudiado la distorsión Kekulé desde sus orígenes. La sección nombrada “Distorsión Kekulé” contiene la formulación del modelo matemático desarrollado por Gamayun et al. (2018) para describir la distorsión Kekulé. Para finalizar se muestran y discuten nuestros resultados obtenidos del cálculo numérico de las estructuras de bandas para distintos sistemas de grafeno y cerramos con nuestras conclusiones.

2. Marco teórico

2.1. Grafeno

El carbono cuenta con cuatro electrones de valencia que le permiten tomar la forma de una gran cantidad de estructuras con distintas propiedades y aplicaciones. El grafeno es una estructura bidimensional compuesta únicamente de átomos de carbono que forman una red cristalina en forma de panal de abeja y es la base de otros alótropos del carbono; como fullerenos, nanotubos de carbono o grafito (figura 1).

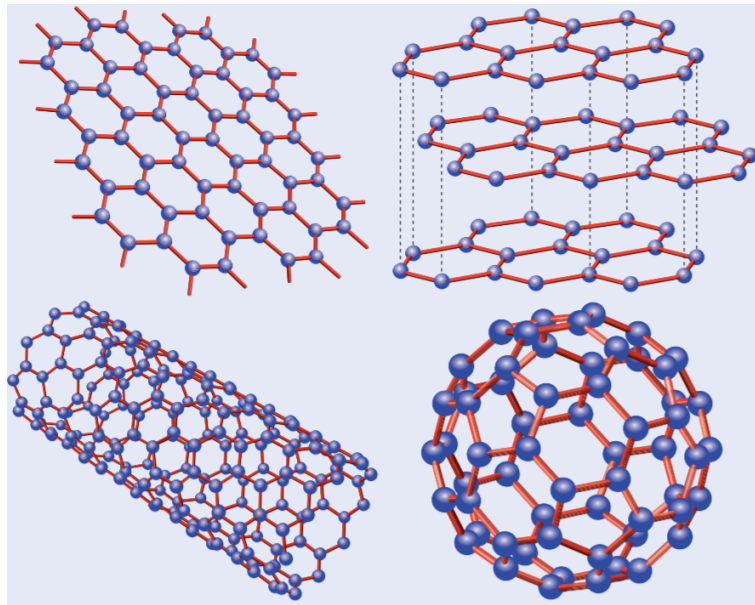


Figura 1: (Arriba a la izquierda) Grafeno, mono-capa bidimensional de átomos de carbono en una red hexagonal. (Arriba a la derecha) Grafito, múltiples capas de grafeno apiladas. (Abajo a la izquierda) Nanotubos de carbono, grafeno enrollado en forma cilíndrica. (Abajo a la derecha) Fullerenos, grafeno curvado con la inclusión de pentágonos para cerrarse en forma esférica. Figura extraída de Neto et al. (2006).

Esta forma hexagonal se debe a una hibridización sp^2 entre un orbital s y dos orbitales p , de manera que los cuatro electrones de valencia del carbono forman tres

enlaces σ trigonales con una distancia entre átomos de 1.42 Å y además un enlace π perpendicular a ellos. Estos enlaces son los responsables de que el grafeno sea un material de muchos superlativos, siendo de los materiales conocidos mas resistentes (Booth et al., 2008) y flexibles (Lee et al., 2008), es portador de la densidad de corriente mas alta a temperatura ambiente registrada hasta ahora (Geim, 2009), además de ser químicamente inerte, casi ópticamente transparente (Nair et al., 2008) y uno de los mejores conductores de calor (Balandin et al., 2008).

Dado que el grafeno es la base del grafito (compuesto de múltiples capas de grafeno apiladas entre sí) y el grafito era un material de gran relevancia después de la segunda guerra mundial debido a sus aplicaciones en reactores nucleares (Bischoff et al., 2015), fue altamente estudiado a finales de los años cuarenta, siendo P. R. Wallace el primero en escribir acerca de la estructura de bandas del grafeno (Wallace, 1947), donde encontró el inusual comportamiento semi-metálico de este material. En ese entonces se consideraba imposible la existencia del grafeno, pero su análisis era una herramienta útil para describir las propiedades del grafito.

Fue hasta el año 2004 cuando el grafeno fue finalmente sintetizado a través de exfoliación mecánica (Novoselov et al., 2004), el método consistió en utilizar cinta adhesiva sobre grafito para arrancar capas y repetir el proceso sobre la muestra obtenida hasta conseguir una sola capa de grafeno. La dificultad de producirlo no residía en el método, si no en la habilidad de poder detectar capas del espesor de un átomo en un área macroscópica, lo cual se logro gracias a los efectos ópticos que este tiene sobre sustratos de SiO_2 .

2.2. Estructura cristalina del grafeno

Un cristal se define como una estructura periódica de grupos idénticos de átomos o moléculas, cuyas simetrías de traslación definen el tipo de red. Generalmente una red cristalina es de tres dimensiones, sin embargo, ya que el grafeno es un material bidimensional, nuestro enfoque es hacia este tipo de redes. Una red de Bravais (en dos dimensiones) es aquella que puede definirse por medio de dos vectores de traslación \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 (vectores de red), tal que la red vista desde un punto \mathbf{r} se ve exactamente igual desde todo punto \mathbf{r}' definido por:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2, \quad (1)$$

Donde n y m son números enteros, de manera que la estructura cristalina es invariante al trasladarse en múltiplos enteros de los vectores de red. Un cristal ideal es infinito, lo cual hace imposible el poder ilustrarlo por completo, sin embargo, debido a su periodicidad es posible visualizarlo con la ayuda del concepto de la celda primitiva, esta celda es aquella que contiene el área mínima posible y que es capaz de llenar todo el espacio con su repetición en las direcciones adecuadas.

La estructura hexagonal del grafeno no forma una red de Bravais, esto debido a que no todos los átomos son invariantes entre sí ante un conjunto finito de traslaciones, pero puede describirse como dos subredes triangulares interpenetradas, etiquetadas como subredes A y B. Esta propiedad da origen al grado de libertad del pseudo-espín (Neto et al., 2009).

Considerando una celda primitiva compuesta por dos átomos, cuya distancia entre ellos es $a_0 = 1.42 \text{ \AA}$ los vectores de red ilustrados en la figura 2 pueden escribirse

como

$$\mathbf{a}_1 = a_0\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3}{2}\right), \quad \mathbf{a}_2 = a_0(\sqrt{3}, 0), \quad (2)$$

y los vectores de vecinos mas cercanos como

$$\boldsymbol{\delta}_1 = a_0(0, 1), \quad \boldsymbol{\delta}_2 = a_0\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right), \quad \boldsymbol{\delta}_3 = a_0\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right), \quad (3)$$

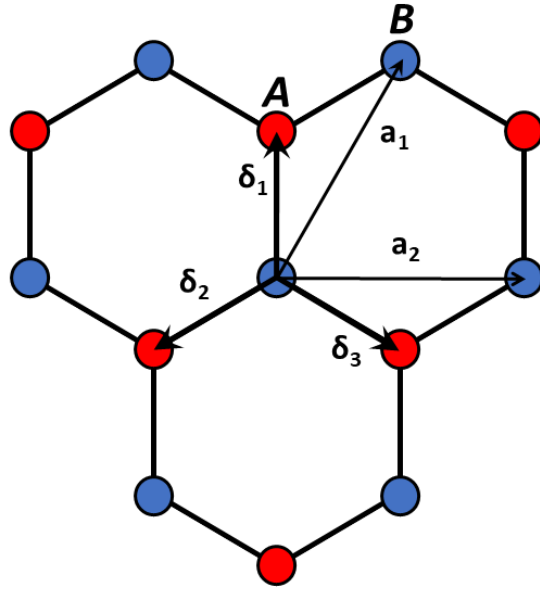


Figura 2: Izquierda: Estructura cristalina del grafeno compuesta de dos subredes triangulares interpenetradas A y B, donde los vectores $\boldsymbol{\delta}$ son los vectores de vecinos mas cercanos y los vectores \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 son los vectores de la red.

Una forma de obtener la celda primitiva es el método de Wigner-Seitz, este consiste en definir un punto en la red (nosotros elegimos el punto medio entre dos átomos de carbono) y trazar líneas imaginarias perpendiculares a la mitad de las líneas que unen ese punto de la red con sus puntos equivalentes mas cercanos, el polígono resultante de las líneas imaginarias es la celda primitiva (Kittel and Fong, 1963). Para el caso del grafeno (figura 3) se tiene un rombo encerrando dos átomos.

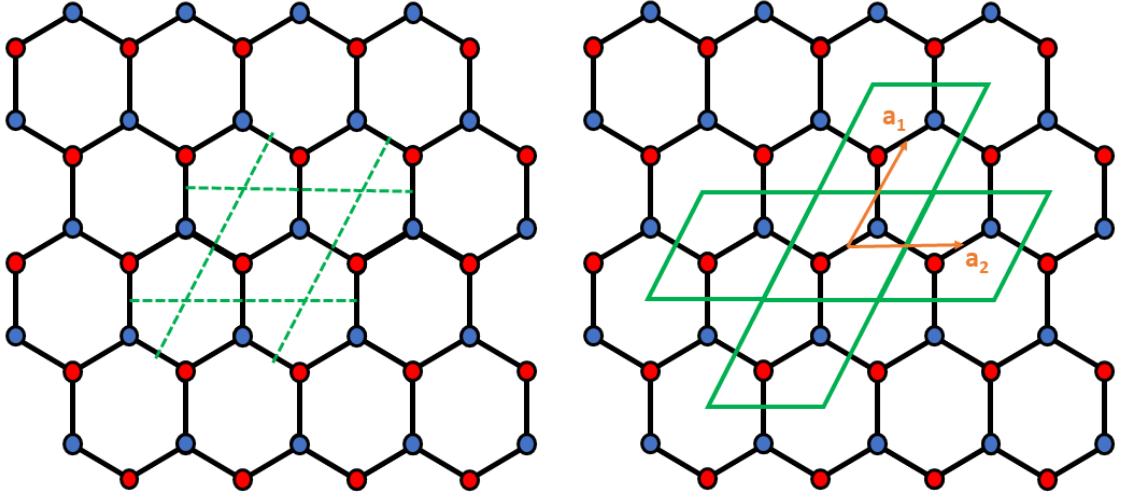


Figura 3: Izquierda: Método de Wigner-Seitz donde se trazan líneas imaginarias perpendiculares a la mitad de los enlaces para obtener la celda primitiva en grafeno. Derecha: Celda primitiva del grafeno y su simetría de traslación dada por los vectores de la red.

2.3. Red recíproca

Debido a la periodicidad presente en los cristales se tiene una situación ideal para un análisis de Fourier, lo cual nos lleva a la red recíproca en el espacio de momentos \mathbf{k} . Así como la red cristalina tiene sus simetrías de traslación definidas por los vectores \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 en la red recíproca estas simetrías están dadas por los vectores, \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 , los cuales se definen tal que

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}, \quad (4)$$

de modo que los vectores de la red recíproca para grafeno son

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a_0} \left(0, \frac{2}{3} \right), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a_0} \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{3} \right). \quad (5)$$

La ventaja de pasar al espacio recíproco como mostró Bloch (1929), es que la

función de onda de los electrones presentes en potenciales periódicos (como es el caso de una estructura cristalina) también es periódica, al igual que la energía, es decir que

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}, \quad (6)$$

por lo que de manera análoga a la celda primitiva, existe una celda de área mínima en la red recíproca con la que podemos conocer el comportamiento de los electrones a cualquier valor de \mathbf{k} conociendo su comportamiento en el régimen de esta celda gracias al teorema de Bloch. Esta celda recibe el nombre de zona de Brillouin (mostrada en la figura 4 para la red de grafeno) y al igual que la celda primitiva puede determinarse a través del método de Wigner-Seitz.

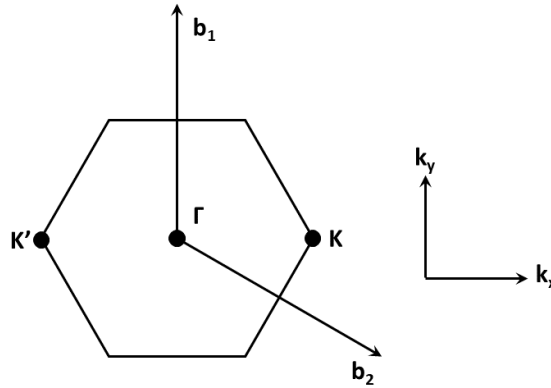


Figura 4: Zona de Brillouin para el grafeno, donde \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 son los vectores de la red recíproca y \mathbf{K} y \mathbf{K}' son los puntos de Dirac inequivalentes entre sí.

2.4. Estructura electrónica de bandas

En una estructura cristalina donde se tiene un número de átomos del orden del número de Avogadro los eigenvalores de energía para los electrones en el cristal forman

bandas de energías permitidas, las zonas sin estados posibles se les conoce como gaps de banda.

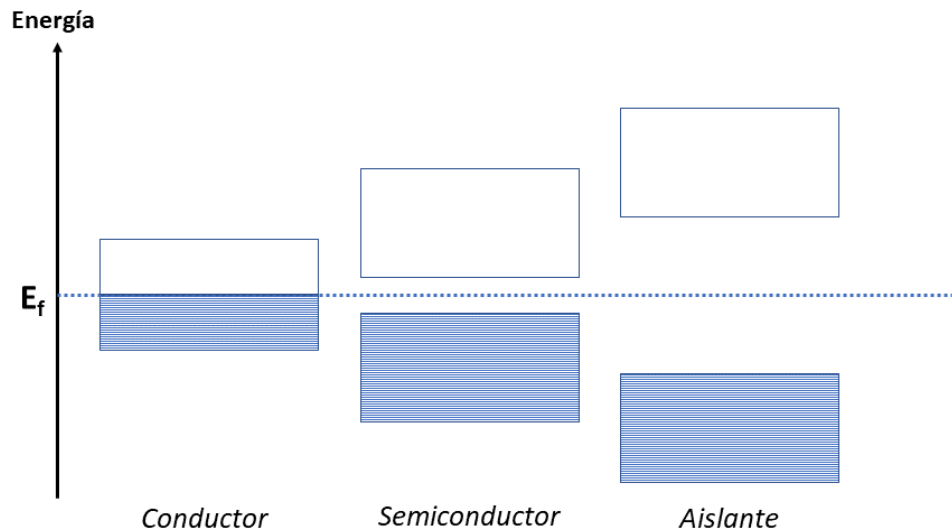


Figura 5: Propiedades electrónicas de los materiales de acuerdo a su estructura de bandas donde E_f es la energía de Fermi. Si las bandas de valencia y conducción se traslapan se tiene un conductor, mientras que si existe un gap entre ellas se trata de un aislante o semi-conductor dependiendo del tamaño del gap.

A partir de la estructura de las bandas es posible determinar las propiedades electrónicas del cristal (figura 5). La banda que se encuentra por encima de la energía de Fermi, E_f , se le conoce como banda de conducción, y la banda por debajo de esta se le conoce como banda de valencia. Si la banda está parcialmente llena, entonces se requiere una energía mínima para excitar un electrón y que haya conducción, por lo general estos materiales son conductores. Por otro lado, si una banda está completamente llena, se requiere una energía equivalente al gap que separa a la siguiente banda para poder excitar a un electrón, estos materiales son aislantes eléctricos, a menos que el gap sea muy pequeño y aplicando un poco de energía se pueda obtener conducción eléctrica, caso de un semiconductor (Jones and March, 1973).

Para obtener la estructura de bandas de grafeno infinito empleamos la aproximación de amarre fuerte a primeros vecinos, en donde solo se considera la posibilidad de que un electrón de la banda π sea transferido de un sitio a uno de sus tres vecinos más cercanos. El hamiltoniano en términos de operadores de aniquilación y creación es

$$\mathcal{H} = - \sum_{\mathbf{r}} \sum_i t_0 a_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}_i} + H.c., \quad (7)$$

siendo t_0 la amplitud de transferencia de electrones entre sitios con valor de 2.8 eV, $a_{\mathbf{r}}^\dagger$ ($b_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}_i}$) el operador de creación (aniquilación) en un sitio de la subred A (B) con posición \mathbf{r} ($\mathbf{r} + \boldsymbol{\delta}_i$) y $H.c.$ el hermitiano conjugado.

Realizando una transformada de Fourier sobre los operadores de aniquilación y creación para pasar al espacio recíproco

$$H(k) = -\epsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + H.c., \quad \epsilon(\mathbf{k}) = t_0 \sum_i e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_i}, \quad (8)$$

de manera directa se puede mostrar que los eigenvalores son

$$E(\mathbf{k}) = \pm |\epsilon(\mathbf{k})| = \pm t_0 \sqrt{3 + 2\text{Cos}(\sqrt{3}k_x a_0) + 4\text{Cos}(\sqrt{3}k_x a_0/2)\text{Cos}(3k_y a_0/2)}. \quad (9)$$

La figura 6 muestra la gráfica de la ecuación (9), de esta estructura de bandas se puede observar algo muy peculiar, las bandas de valencia y de conducción se tocan en seis puntos, a diferencia de un aislante no hay gap, por otro lado no hay bandas parcialmente llenas como en un conductor, por ello se le puede considerar un semiconductor de gap cero o un semimetal. Además de tocarse en estos seis puntos llamados puntos de Dirac, tiene la característica de que alrededor de ellos se tiene una relación de dispersión en forma de conos conocidos como conos de Dirac,

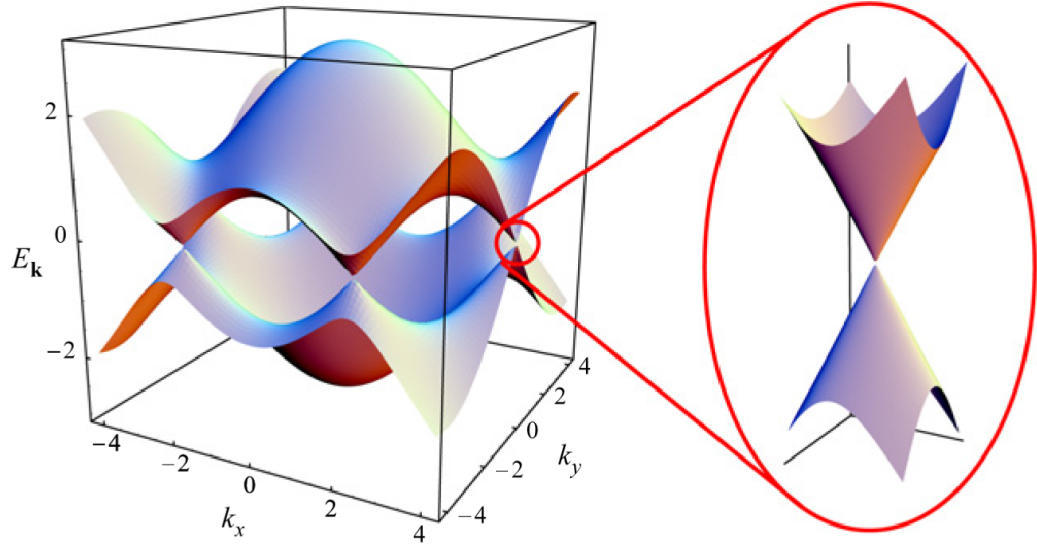


Figura 6: Estructura de bandas de grafeno infinito en la zona de Brillouin en unidades de t . La banda de valencia y la banda de conducción se tocan en seis puntos conocidos como puntos de Dirac y alrededor de estos se tienen segmentos lineales conocidos como conos de Dirac. Figura extraída de Peres (2009).

evidentemente cerca de estos conos la relación entre la energía y momento es lineal de manera similar a las partículas relativistas sin masa, por lo que estos electrones son conocidos como fermiones de Dirac y se mueven con una velocidad constante aproximadamente trescientas veces menor que la velocidad de la luz.

Los puntos de Dirac se dividen en dos grupos, los puntos \mathbf{K} y los puntos \mathbf{K}' , también conocidos como valles. Esto es consecuencia de tener una red compuesta de dos subredes que en el espacio recíproco se traduce a dos vectores de onda inequivalentes. Si se realiza una aproximación a bajas energías, es decir, expandir a primer orden alrededor del punto \mathbf{K} se puede obtener el siguiente hamiltoniano efectivo

$$H = v_f(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}), \quad (10)$$

donde v_f es la velocidad de Fermi y σ son las matrices de Pauli asociadas al grado de libertad del pseudo-espín. De esta ecuación se puede observar como a bajas energías el momento de los electrones va alineado con el pseudo-espín y como estos se propagan sin inercia con una velocidad constante v_f .

2.5. Nanocintas de grafeno

Conforme se reducen las dimensiones del grafeno es necesario tomar en cuenta los efectos de los bordes ya que traen consigo grandes implicaciones sobre el espectro de bajas energías de los electrones de la banda π (Wakabayashi et al., 2010). Una nanocinta de grafeno consiste en una cinta de este material en donde su ancho es de unos cuantos átomos, mientras que en comparación podemos considerar infinito su largo. Debido a la forma de la red cristalina del grafeno existen distintos tipos de bordes para las nanocintas, siendo los principales el corte zigzag y el corte *armchair* mostradas en la figura 7.

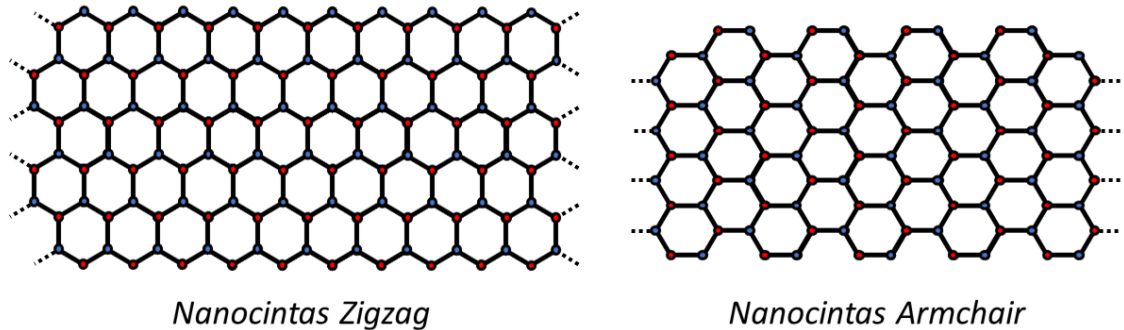


Figura 7: Direcciones principales de corte de nanocintas de grafeno.

El proceso para derivar la estructura de bandas de las nanocintas es similar al del grafeno infinito, en este caso se toma una celda primitiva transversal a la nanocinta, de manera que con repetirla en una sola dirección es posible recrear toda

la estructura (Datta, 2005). Aprovechando la periodicidad de esta manera, podemos reducir el hamiltoniano para la n -ésima celda a solo tres partes

$$H\psi_n = H_0\psi_n + H_{01}\psi_{n+1} + H_{10}\psi_{n-1}, \quad (11)$$

donde H_0 es el hamiltoniano de la estructura de repetición, H_{01} (H_{10}) es el hamiltoniano que conecta la celda primitiva con su vecino posterior (anterior) separados por una distancia a . Nuevamente se puede emplear el teorema de Bloch, tal que

$$\psi_n = \phi e^{ikna}, \quad (12)$$

aplicando (12) en (11) se puede llegar a

$$H\phi = (H_0 + H_{01}e^{ika} + H_{10}e^{-ika})\phi \quad (13)$$

por lo que

$$(H_0 + H_{01}e^{ika} + H_{10}e^{-ika})\phi = E\phi \quad (14)$$

resolviendo numéricamente esta ecuación de Schrödinger podemos encontrar la estructura de bandas para cada tipo de nanocinta.

2.5.1. Nanocintas zigzag

La celda primitiva para el corte zigzag esta dada por la figura 8 y su respectiva estructura de bandas por la figura 9. Estas siempre tienen un comportamiento semi-metalico y una de las características mas notables es la degeneración de la banda de valencia y la banda conducción alrededor de $k = \pm \frac{2\pi}{3}$, además de la aparición de

bandas planas que reflejan una alta localización en los bordes de la nanocinta. Estos estados son consecuencia del tipo de corte realizado y no de la estructura de bandas original del grafeno (Fujita et al., 1996).

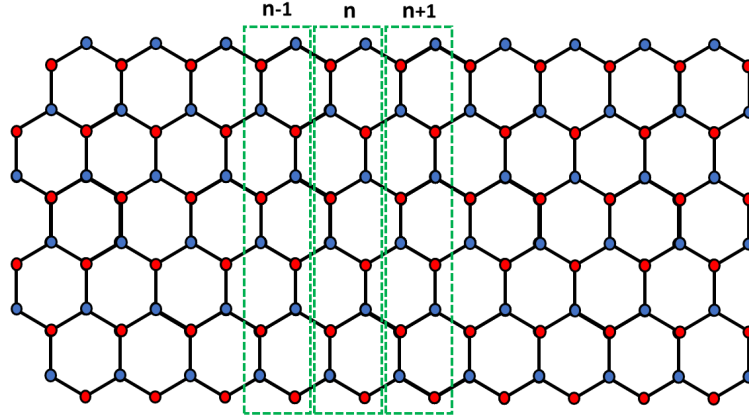


Figura 8: Celda primitiva de nanocintas zigzag así como sus celdas vecinas que muestran la simetría de traslación de la celda, indicadas por las líneas verdes punteadas.

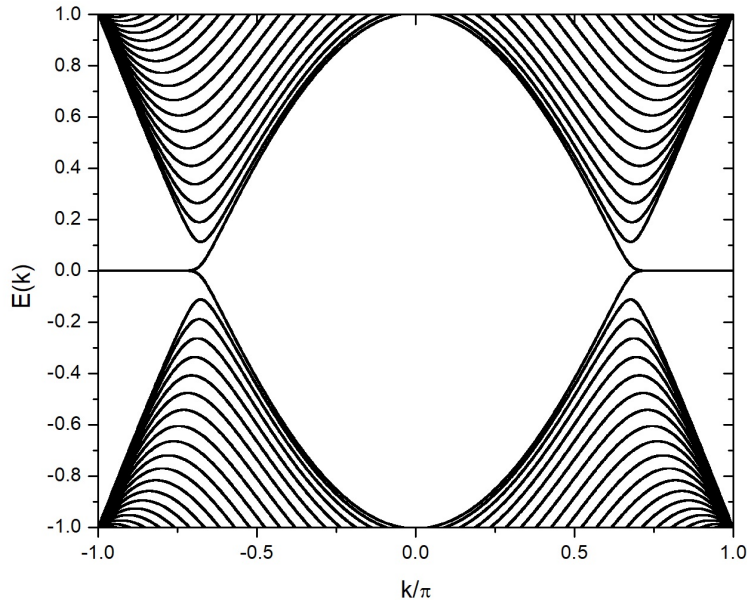


Figura 9: Estructura de bandas para una nanocinta zigzag con 80 sitios de ancho. Se puede apreciar la ausencia de gaps y la aparición de bandas planas y al igual que el grafeno infinito tiene un comportamiento semi-metálico.

2.5.2. Nanocintas *armchair*

Debido a la forma de las nanocintas *armchair* es necesario tomar una celda unitaria de mayor tamaño en comparación a la celda del caso zigzag como se muestra en la figura 10.

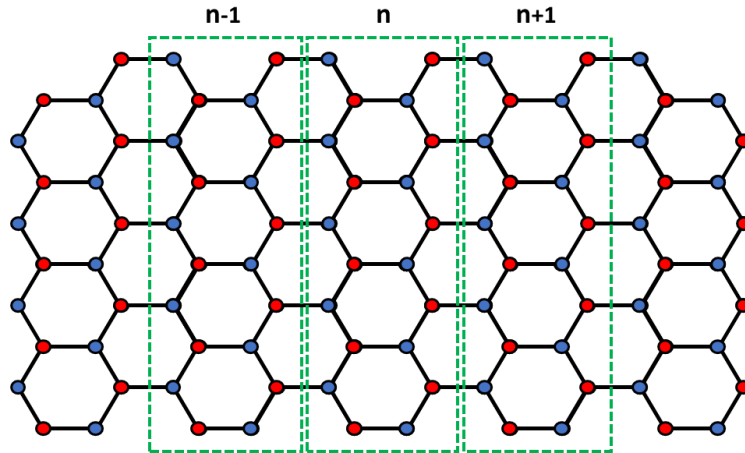


Figura 10: Celda primitiva de nanocintas *armchair* ilustrada por la línea verde punteada al igual que sus vecinos adyacentes. Para el caso *armchair* se tiene una celda primitiva de mayor tamaño comparada con el caso zigzag.

La estructura de bandas de las nanocintas *armchair* tiene por lo general bandas parabólicas, además de tener la consecuencia de la apertura de un pequeño gap, lo cual les da un comportamiento semiconductor, sin embargo, existe un caso particular, cuando se tiene un ancho de $(3n - 1)$ sitios, donde n es cualquier número entero, aparecen modos linealmente dispersivos que cierran el gap y esta adquiere un comportamiento metálico (Wakabayashi et al., 2010). Ambos casos se muestran en la figura 11.

Las gráficas de estructura de bandas presentes tienen la energía en unidades de la amplitud de transmisión $t=2.8$ eV, con $E_f=0$ y \mathbf{k} normalizado por el vector de

traslación primitivo correspondiente a cada cinta.

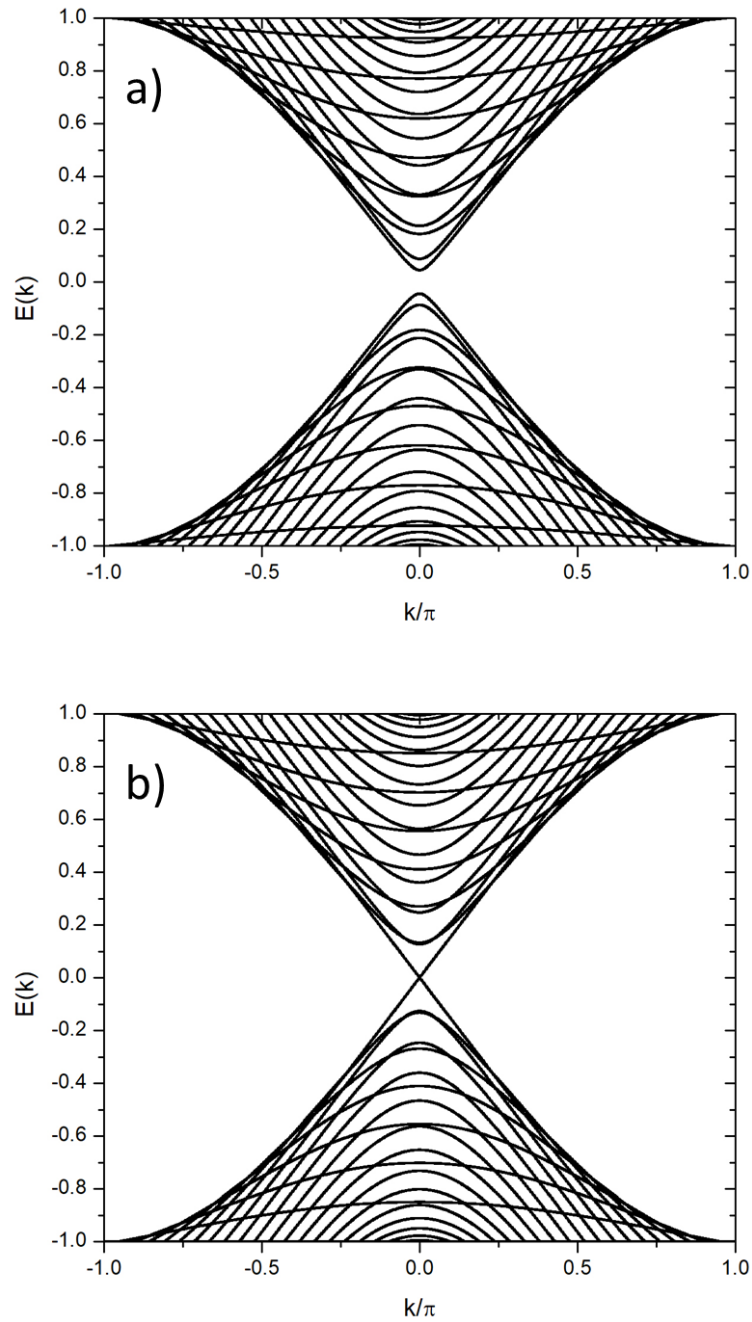


Figura 11: a) Estructura de bandas de nanocinta *armchair* con un ancho de 40 sitios, al tener un pequeño gap esta tiene un comportamiento semiconductor. b) Estructura de bandas de nanocinta *armchair* con un ancho de 41 sitios, la cual tiene un comportamiento metálico debido al cruce de las bandas en $k = 0$.

3. Antecedentes

En el año 2000, Claudio Chamon estudió los efectos que tienen las deformaciones de red en las propiedades electrónicas de nanotubos de carbono. Entre las distorsiones consideradas se encuentra la “distorsión Kekulé”, la cual consiste en enlaces de mayor y menor distancia entre átomos de carbono que se traduce en una diferencia en la amplitud de transmisión entre primeros vecinos (Chamon, 2000). Esta distorsión recibe el nombre de Kekulé ya que la estructura de enlaces alternantes es similar a la de los anillos de benceno (figura 12), cuya forma fue propuesta por el químico alemán August Kekulé. Este patrón en particular fue posteriormente nombrado Kek-O para distinguirlo de entre otros patrones que tienen una periodicidad idéntica.

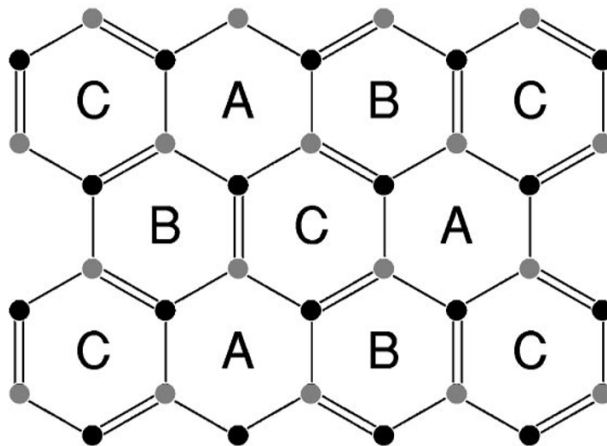


Figura 12: Distorsión Kekulé, los enlaces con doble línea indican una mayor amplitud de transmisión que aquellos con una sola y las letras A, B y C denotan las tres familias de hexágonos que se forman. Figura extraída de Chamon (2000)

Posteriormente Hou et al. (2007) encontraron que en el grafeno es posible obtener excitaciones topológicas con carga fraccionaria que respetan la simetría de inversión temporal gracias a que la textura Kekulé combina ambos valles. Cheianov et al.

(2009) mostraron que por debajo de cierta temperatura crítica, átomos adsorbidos en la superficie de grafeno tienen una preferencia a correlacionarse espacialmente formando un mosaico Kekulé, esto debido a oscilaciones de Friedel en la densidad electrónica del grafeno.

Múltiples grupos empezaron a reportar aplicaciones de la textura Kekulé en el área de aislantes topológicos. Lin et al. (2017) analizaron grafeno sobre aislantes topológicos como Sb_2T_3 y Bi_2T_3 formando un patrón Kek-O como mecanismo para abrir un gap en el grafeno. Uno de los descubrimientos más peculiares es para el caso de nanocintas con textura Kek-O, donde se encontró que para nanocintas *armchair* si la amplitud de probabilidad de transmisión del patrón Kekulé disminuye en vez de aumentar, aparecen estados de borde topológicos, aun cuando la curvatura de Berry es igual a cero, siendo un análogo al efecto Aharonov-Bohm (Liu et al., 2017; Lin et al., 2017). Kariyado et al. (2017) consideraron una interfaz donde una nanocinta zigzag con distorsión Kek-O se une a otra nanocinta paralela a ésta que tiene una distorsión Kek-O inversa, lo que provoca que los estados localizados en los bordes se vuelvan estados de borde dispersivos.

Recientemente Gutiérrez et al. (2016) lograron observar de manera experimental un patrón Kekulé en grafeno creado a través de deposición química de vapor sobre la superficie de cristal Cu (111), el patrón creado adquiere una textura de enlaces con forma de "Y", por lo que se le llama textura Kek-Y. En la figura 13 se puede apreciar la comparación entre la teoría y la observación experimental obtenida a través de microscopía de barrido de efecto túnel (STM por sus siglas en inglés). Gutiérrez et al. (2016) supusieron que la textura Kek-Y tendría un efecto similar de abrir un gap como en la textura Kek-O.

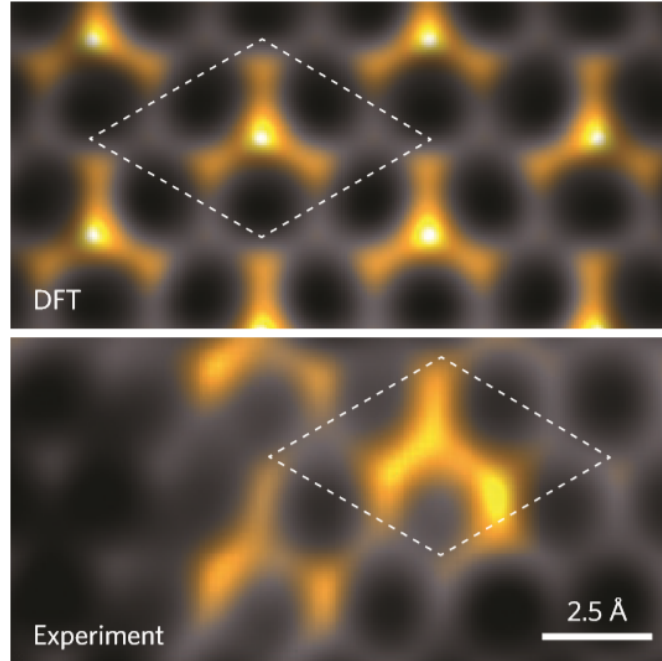


Figura 13: (Arriba) Simulación hecha a través de la teoría del funcional de densidad (DFT por sus siglas en inglés). (Abajo) Observación experimental obtenida por STM. Figura extraída de Gutiérrez et al. (2016)

Posteriormente Gamayun et al. (2018) estudiaron el caso de la textura Kek-Y y encontraron que esta textura no tiene el efecto de abrir un gap en el grafeno, sin embargo, ellos descubrieron que a bajas energías el grafeno con esta textura tiene un acoplamiento del grado de libertad del valle con el momento, de manera similar al acoplamiento que el grafeno tiene entre su pseudo-espín y el momento. Además de esto crearon un modelo matemático para describir la textura Kekulé en la aproximación de amarre fuerte que se explica en la siguiente sección.

4. Distorsión Kekulé

En esta sección se desarrollan los cálculos detrás de las propiedades electrónicas de grafeno con distorsión Kekulé, empleando el modelo desarrollado por Gamayun et al. (2018), considerando dos tipos de textura Kekulé, la textura Kek-O y la textura Kek-Y mostradas en la figura 14.

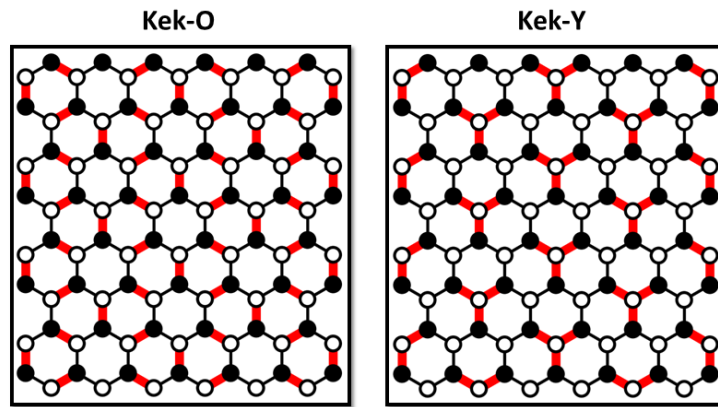


Figura 14: Texturas Kekulé donde se tiene una diferencia en la fuerza de los enlaces, siendo mas fuertes aquellos marcados en rojo.

Debido a que el tamaño de la distorsión Kekulé es mayor que la celda primitiva para el grafeno, es necesario tomar una celda nueva de mayor tamaño, redefiniendo la periodicidad de la red cristalina. Esta nueva celda (figura 15) es formada por un hexágono que encierra seis átomos de carbono en lugar de los dos usuales.

4.1. Nueva zona de Brillouin

A consecuencia de incrementar el tamaño de la celda primitiva, la zona de Brillouin tiene que reducir su tamaño en la misma proporción, esto se puede visualizar

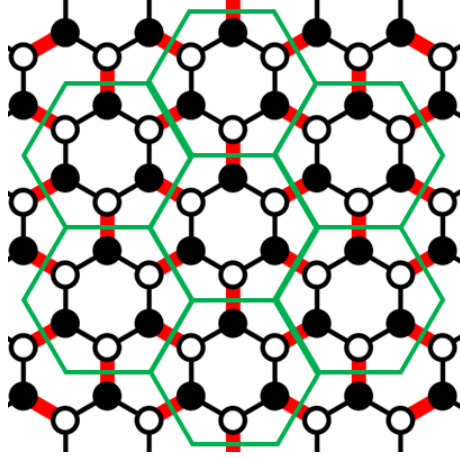


Figura 15: Celda primitiva aumentada, válida para ambas texturas.

como un doblez sobre sí misma, trayendo los valles originalmente inequivalentes desde los vértices de la zona de Brillouin original hasta el centro de la nueva como se muestra en la figura 16. Los valles se degeneran en el centro debido a que los átomos adsorbidos que forman el patrón Kekulé rompen la simetría traslacional, lo que habilita a la dispersión entre valles.

Por simplicidad tomaremos $a_0 = 1$, de manera que los nuevos vectores de la red recíproca son

$$\mathbf{K}_+ = \frac{2}{9}\pi\sqrt{3} \left(1, \sqrt{3}\right), \quad \mathbf{K}_- = \frac{2}{9}\pi\sqrt{3} \left(-1, \sqrt{3}\right), \quad (15)$$

y el vector de onda Kekulé que acopla los valles por

$$\mathbf{G} = \mathbf{K}_+ - \mathbf{K}_- = \frac{4}{9}\pi\sqrt{3} (1, 0). \quad (16)$$

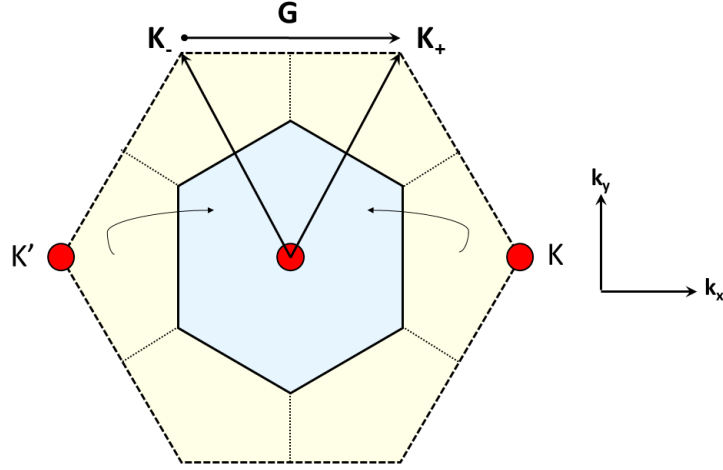


Figura 16: Nueva zona de Brillouin en azul, con vectores de red recíproca \mathbf{K}_+ y \mathbf{K}_- donde los valles \mathbf{K} y \mathbf{K}' están acoplados en el centro por el vector \mathbf{G} . La zona de Brillouin original está marcada por la línea punteada.

4.2. Distorsión Kekulé en la aproximación de amarre fuerte

Para realizar el análisis de las propiedades electrónicas se introduce una amplitud de transmisión variable en la aproximación de amarre fuerte, tal que en el modelo desarrollado por Gamayun et al. (2018) el hamiltoniano es

$$\mathcal{H} = - \sum_{\mathbf{r}} \sum_i t_{\mathbf{r},i} a_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}+\delta_i} + H.c., \quad (17)$$

donde

$$t_{\mathbf{r},i} = t_0 (1 + 2\text{Re}[\Delta e^{i(p\mathbf{K}_+ + q\mathbf{K}_-) \cdot \delta_i + i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}]) \quad (18)$$

Los números $p, q \in \mathbb{Z}_3$, donde \mathbb{Z}_3 representa el conjunto de números posibles de obtener como resultado al aplicar modulo 3 sobre un número entero. Estos números

p y q caracterizan el tipo de textura a través de

$$\nu = 1 + q - p \pmod{3}, \quad (19)$$

tal que si $\nu = 0$ se tiene una textura Kek-O, mientras que si $\nu = \pm 1$ es el caso de la textura Kek-Y. Δ es la amplitud de acoplamiento cuya magnitud indica la intensidad de la distorsión.

Pasando al espacio de momentos realizando la transformada de Fourier de los operadores de aniquilación y creación el hamiltoniano adquiere la siguiente forma,

$$\begin{aligned} H(\mathbf{k}) = & -\epsilon(\mathbf{k})a_{\mathbf{k}}^{\dagger}b_{\mathbf{k}} - \Delta\epsilon(\mathbf{k} + p\mathbf{K}_+ + q\mathbf{K}_-)a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\dagger}b_{\mathbf{k}} \\ & - \Delta\epsilon(\mathbf{k} - p\mathbf{K}_+ - q\mathbf{K}_-)a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\dagger}b_{\mathbf{k}} + H.c, \end{aligned} \quad (20)$$

juntando los operadores de aniquilación y creación en \mathbf{k} y $\mathbf{k} \pm \mathbf{G}$ en el vector columna,

$$c_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} \\ a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} \\ a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} \\ b_{\mathbf{k}} \\ b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} \\ b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} \end{pmatrix}, \quad (21)$$

es posible escribir el hamiltoniano como,

$$H(\mathbf{k}) = -c_{\mathbf{k}}^{\dagger} \begin{pmatrix} 0 & \xi_{\nu}(\mathbf{k}) \\ \xi_{\nu}^{\dagger}(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} c_{\mathbf{k}}, \quad (22a)$$

donde

$$\xi_\nu = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & \tilde{\Delta}\epsilon_{\nu+1} & \tilde{\Delta}^*\epsilon_{-\nu-1} \\ \tilde{\Delta}^*\epsilon_{1-\nu} & \epsilon_{-1} & \tilde{\Delta}\epsilon_\nu \\ \tilde{\Delta}\epsilon_{\nu-1} & \tilde{\Delta}^*\epsilon_{-\nu} & \epsilon_1 \end{pmatrix}, \quad (22b)$$

y se ha definido

$$\tilde{\Delta} = e^{2\pi i(p+q)/3}\Delta, \quad \xi_n = \epsilon(\mathbf{k} + n\mathbf{G}), \quad (22c)$$

donde se utilizaron las propiedades

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k} + 3\mathbf{K}_\pm) = e^{2\pi i/3}\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{K}_+ + \mathbf{K}_-), \quad (22d)$$

esta ultima ecuación muestra las simetrías que tiene el espacio recíproco con los vectores \mathbf{K}_\pm .

4.3. Aproximación a bajas energías

A bajas energías las contribuciones predominantes son las correspondientes a los modos $u_{\mathbf{k}} = (a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}, a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}, b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}, b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}})$, lo cual para valores de \mathbf{k} pequeños se encuentran en la vecindad de los valles (el valle \mathbf{K} corresponde a $+\mathbf{G}$, mientras que el valle \mathbf{K}' a $-\mathbf{G}$), en este subespacio de cuatro componentes el hamiltoniano queda como,

$$H_{eff} = -u_{\mathbf{k}}^\dagger \begin{pmatrix} 0 & h_\nu \\ h_\nu^\dagger & 0 \end{pmatrix} u_{\mathbf{k}}, \quad (23a)$$

con h_ν dado por,

$$h_\nu = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \tilde{\Delta}\epsilon_\nu \\ \tilde{\Delta}^*\epsilon_{\nu-1} & \epsilon_1 \end{pmatrix}. \quad (23b)$$

Ya que estamos considerando el espectro a bajas energías es posible linearizar ϵ_n ,

$$\epsilon_0 = 3t_0, \quad \epsilon_{\pm 1} = \hbar v_0(\mp k_x + ik_y), \quad (24)$$

donde $v_0 = \frac{3}{2}t_0a_0/\hbar$ es la velocidad de Fermi. Reacomodando los términos se obtiene la ecuación de Dirac de cuatro componentes,

$$\mathcal{H} \begin{pmatrix} \Psi_{\mathbf{K}'} \\ \Psi_{\mathbf{K}} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_{\mathbf{K}'} \\ \Psi_{\mathbf{K}} \end{pmatrix}, \quad (25a)$$

donde $\Psi_{\mathbf{K}}$ y $\Psi_{\mathbf{K}'}$ son espinores de dos componentes,

$$\Psi_{\mathbf{K}'} = \begin{pmatrix} -\psi_{B,K'} \\ \psi_{A,K'} \end{pmatrix}, \quad \Psi_{\mathbf{K}} = \begin{pmatrix} \psi_{B,K} \\ \psi_{A,K} \end{pmatrix}, \quad (25b)$$

explícitamente,

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} v_0 \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} & \tilde{\Delta} Q_\nu \\ \tilde{\Delta}^* Q_\nu^\dagger & v_0 \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}, \quad (25c)$$

donde hemos definido,

$$Q_\nu = \begin{pmatrix} \epsilon_{-\nu}^* & 0 \\ 0 & -\epsilon_\nu \end{pmatrix} = \begin{cases} Q_0 = 3t_0\sigma_z \\ Q_{\pm 1} = v_0(\pm p_x - ip_y)\sigma_0 \end{cases}, \quad (25d)$$

Ψ_K es el espinor que contiene la función de onda correspondiente a las subredes A y B en el valle \mathbf{K} y de igual manera $\Psi_{K'}$ para el valle \mathbf{K}' .

A partir de aquí se pueden obtener los eigenvalores a bajas energías, para el caso

Kek-O ($\nu = 0$) se tiene un espectro de energías con gap,

$$E^2 = v_0^2 |\mathbf{p}|^2 + (3t_0 |\Delta|)^2, \quad (26)$$

mientras que para la textura Kek-Y ($|\nu| = 1$) aparece un espectro energético sin gap con dos modos linealmente dispersivos con distintas velocidades $v_0(1 \pm |\Delta|)$,

$$E_{\pm}^2 = v_0^2 (1 \pm |\Delta|)^2 |\mathbf{p}|^2. \quad (27)$$

4.4. Acoplamiento valle-momento

Para el caso de la textura Kek-Y se tiene el pseudo-espín e isoespín del valle alineado a la dirección de movimiento, para visualizarlo Gamayun et al. (2018) proponen considerar el caso $\nu = 1$ con $\tilde{\Delta} = \Delta_0$, donde Δ_0 es real, de esta manera el hamiltoniano puede escribirse de una manera mas compacta donde aparecen estos efectos de manera explícita,

$$\mathcal{H} = v_{\sigma} (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \otimes \boldsymbol{\tau}_0 + v_{\tau} \sigma_0 \otimes (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\tau}), \quad (28)$$

aquí se empleó un juego adicional de matrices de Pauli τ para el grado de libertad del valle. Las velocidades son $v_{\sigma} = v_0$ y $v_{\tau} = \Delta_0 v_0$.

5. Resultados y discusiones

5.1. Estructura de bandas de grafeno con distorsión Kekulé

Para iniciar el análisis de las propiedades electrónicas se obtuvo la estructura de bandas para grafeno con distorsión Kekulé de manera numérica a través de la implementación de un código en fortran. También se escribieron rutinas en python utilizando el paquete Kwant (Groth et al., 2014). Hay que recordar que por sí solo, el hecho de tomar una celda unitaria mayor modifica la zona de Brillouin, reduciendo su tamaño, esto resulta en un doblez de las bandas en la primera zona de Brillouin. Para distinguir los efectos que tiene la distorsión Kekulé primero obtenemos la estructura de bandas de grafeno pristino en la nueva zona de Brillouin ilustrada en la figura 17. Las gráficas de estructuras de bandas tienen la energía E en unidades de t_0 y \mathbf{k} en unidades de $\frac{2\pi}{3a}$.

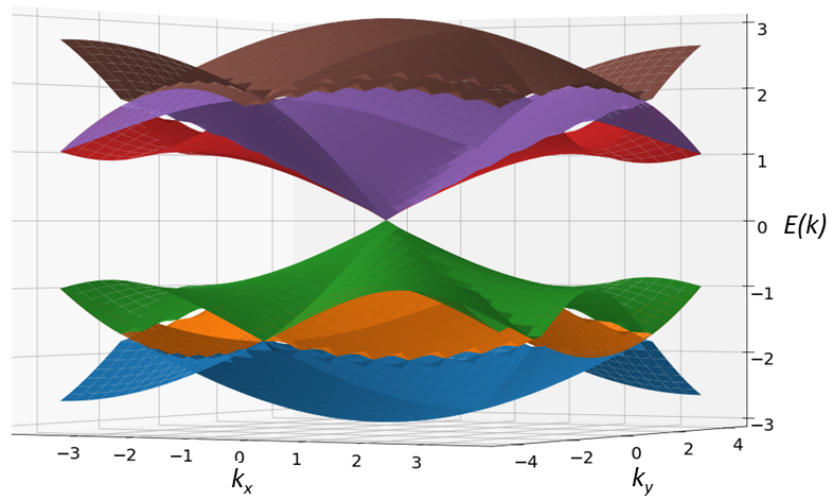


Figura 17: Estructura de bandas de grafeno infinito en la nueva zona de Brillouin donde se tiene ambos valles degenerados en su centro.

Dado que la nueva celda contiene seis átomos de carbono, la nueva estructura de

bandas presenta seis bandas, dos de estas corresponden a las bandas originales cortadas por los límites de la zona de Brillouin reducida, las otras cuatro corresponden a las bandas de valencia y conducción de cada valle. En la figura 18 se ilustra como la mezcla de estas bandas da como resultado el cono del centro de la figura 17.

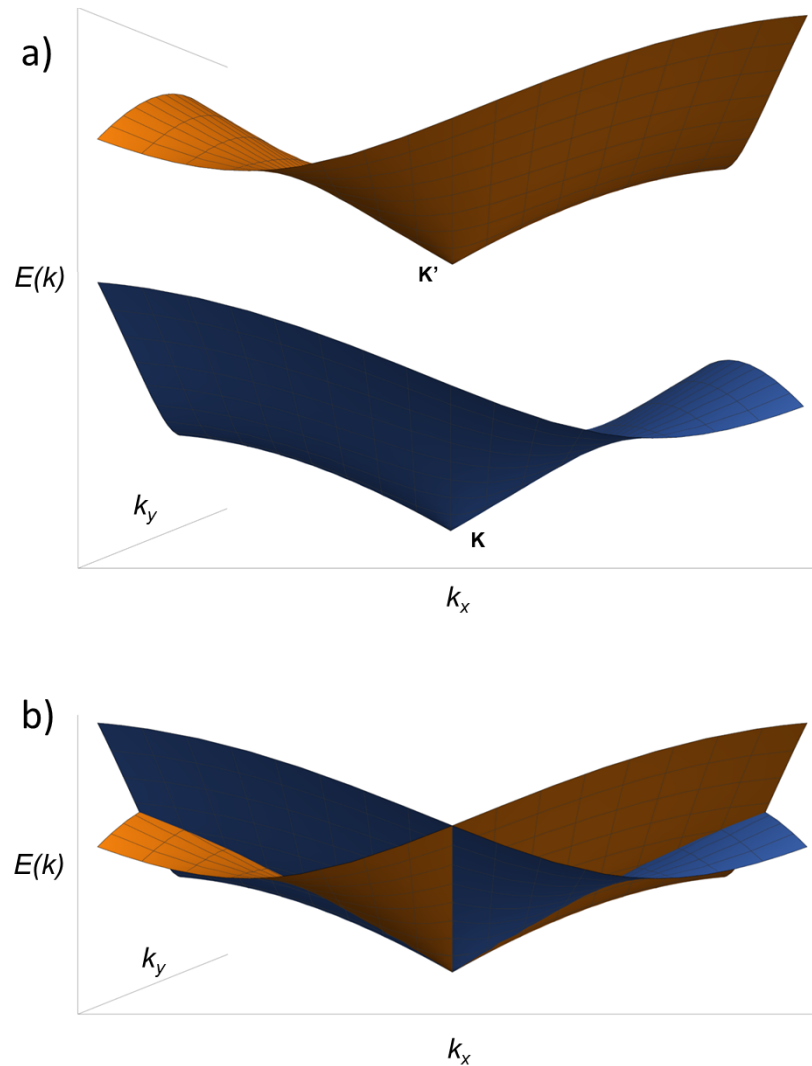


Figura 18: a) Bandas de conducción alrededor de los dos valles inequivalentes K (color azul) y K' (color naranja). b) La superposición de ambas bandas. Esta superposición da origen al cono centrado en el origen de la figura 17.

Ahora que conocemos la relación de dispersión en esta base sin perturbar podemos

compararla con la de las texturas Kekulé, utilizando nuestro código realizado en Kwant con un parámetro de $\Delta = 0.1$ obtenemos las estructuras de bandas para la textura Kek-O y Kek-Y que se muestran en la figura 19 y 20 respectivamente.

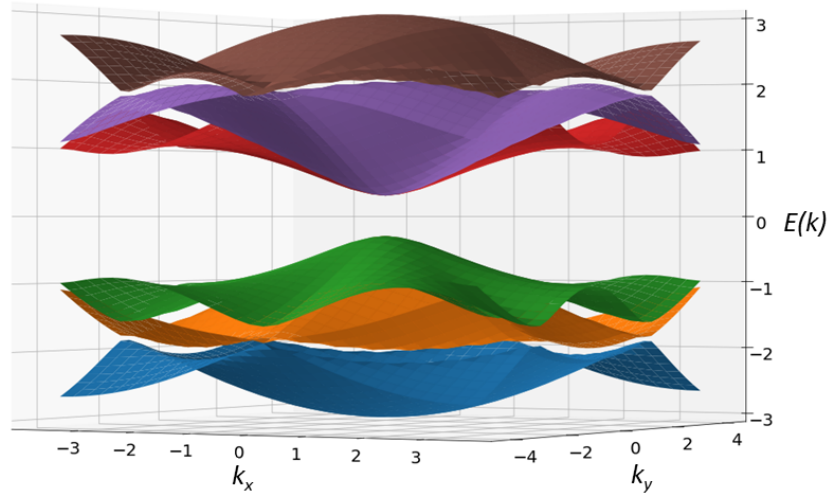


Figura 19: Estructura de bandas de grafeno infinito con textura Kek-O. Se puede apreciar la aparición de un gap de tamaño considerable ($6t_0\Delta$).

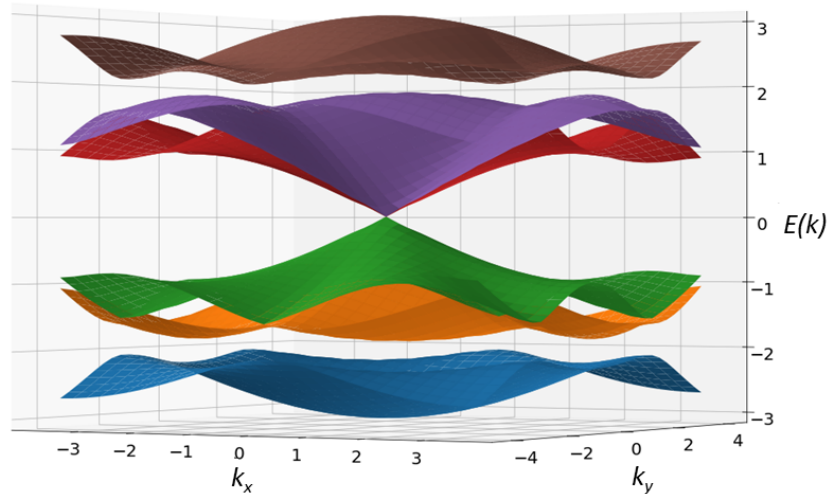


Figura 20: Estructura de bandas de grafeno infinito con textura Kek-Y. Aquí se sigue teniendo un comportamiento de partículas relativistas sin masa dado que prevalece la relación de dispersión lineal a bajas energías.

Como se había mencionado antes, la textura Kek-O abre un gap en grafeno, este gap es de una magnitud de $6t_0\Delta$, mientras que para la textura Kek-Y sigue teniendo un espectro sin gap con una dispersión lineal alrededor de $\mathbf{k} = 0$.

5.2. Nanocintas con distorsión Kekulé

El enfoque de ésta tesis está en el transporte electrónico de nanocintas de grafeno, por lo que se procedió a realizar cálculos de los eigenvalores de la energía resolviendo la ecuación (14) de manera numérica, utilizando nuevamente rutinas en fortran y además en el software kwant para comparar resultados, esto tanto para nanocintas *armchair* como zigzag.

5.2.1. Nanocintas *armchair* con distorsión Kekulé

Para las nanocintas *armchair* se puede utilizar una celda unitaria del mismo tamaño que en el caso de grafeno pristino ya que la simetría de estas nanocintas coincide con la distorsión Kekulé (figuras 21 y 22), por lo que la zona Brillouin también permanece constante para este caso.

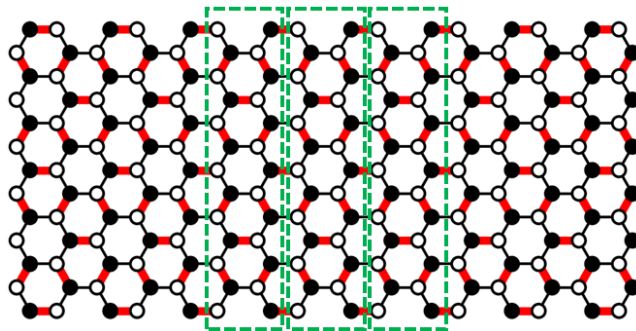


Figura 21: Celda primitiva para nanocintas *armchair* con textura Kek-O.

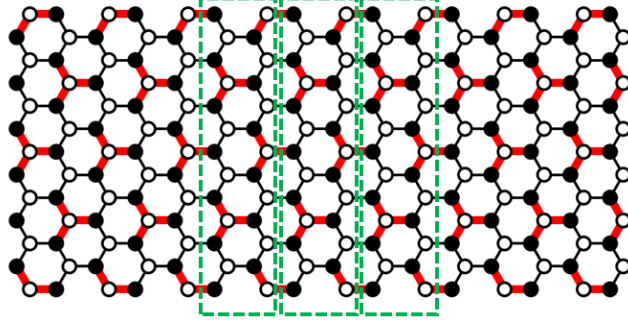


Figura 22: Celda primitiva para nanocintas *armchair* con textura Kek-Y.

Debido a que para este tipo de nanocintas la estructura de bandas cambia considerablemente dependiendo del ancho de la nanocinta, se obtiene la estructura de bandas tanto para el caso de las nanocintas *armchair* semi-conductoras como metálicas.

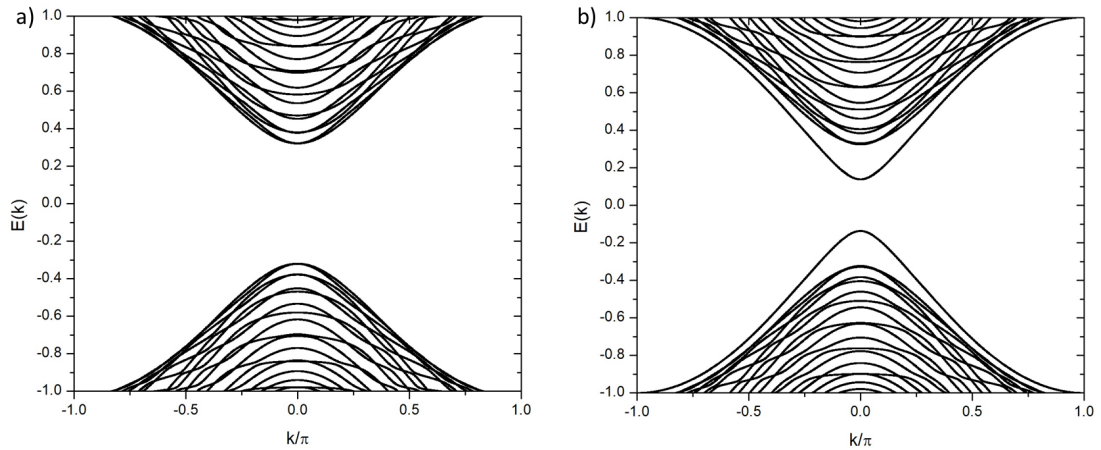


Figura 23: Estructura de bandas de nanocintas *armchair* con textura Kek-O. a) Nanocinta con 40 sitios de ancho que correspondería a una nanocinta semi-conductora en ausencia de distorsión Kekulé. b) Nanocinta con 41 sitios de ancho que correspondería a una nanocinta metálica en ausencia de distorsión Kekulé. Para ambos casos se abre un gap, el cual es considerablemente menor para la nanocinta con 41 sitios.

De la figura 23 se observa como se manifiesta el gap propio de la textura Kek-O, sin embargo, en la nanocinta que correspondería a una del tipo metálico en grafeno

prístino se puede observar como el gap es reducido por un par de modos dispersivos que originalmente se encargaban de cerrar el gap y dar el carácter metálico.

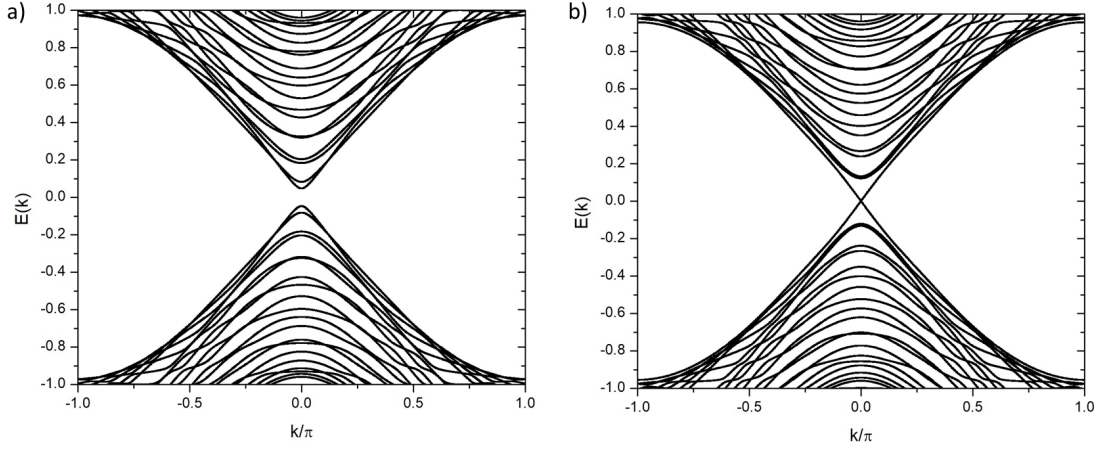


Figura 24: Estructura de bandas de nanocintas *armchair* con textura Kek-Y. a) Nanocinta con 40 sitios de ancho que correspondería a una nanocinta semi-conductora en ausencia de distorsión Kekulé. b) Nanocinta con 41 sitios de ancho que correspondería a una nanocinta metálica en ausencia de distorsión Kekulé. Se puede apreciar como la textura Kek-Y en nanocintas *armchair* no cambia de manera considerable las propiedades originales de cada nanocinta.

Por otro lado la textura Kek-Y no presenta una diferencia considerable en la estructura electrónica de las bandas para este caso (figura 24), de hecho preserva las propiedades originales de las cintas dejando una como semiconductor y la otra metálica.

5.2.2. Nanocintas zigzag con distorsión Kekulé

Para las nanocintas zigzag la transición no es directa como en el caso *armchair*, ya que con el tamaño de la celda primitiva original no es posible recrear el patrón Kekulé, entonces como en el caso del grafeno infinito es necesario tomar una nueva celda unitaria, esto se ilustra en la figura 25.

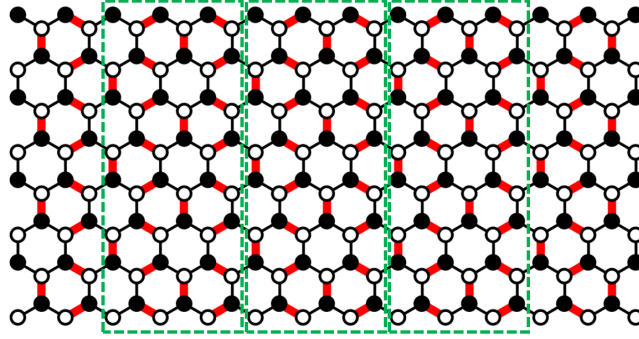


Figura 25: Celda primitiva para nanocintas zigzag con textura Kek-O, donde se tiene una celda de mayor tamaño debido a la periodicidad de la distorsión Kekulé.

Nuevamente tener una celda unitaria de mayor tamaño implica una nueva zona de Brillouin reducida, por lo que es recomendable primero obtener la estructura de bandas para nanocintas de grafeno prístino en la nueva zona de Brillouin (figura 26), para poder comparar con las resultantes de introducir la distorsión Kekulé.

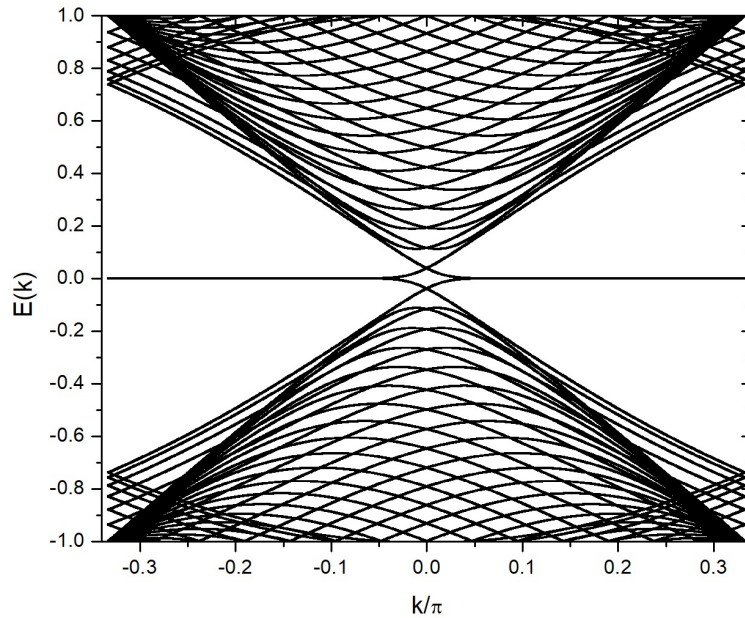


Figura 26: Estructura de bandas de una nanocinta zigzag de grafeno prístino en la zona de Brillouin reducida.

Así como en el caso de grafeno prístino, en el que la estructura de bandas en su correspondiente zona de Brillouin reducida era un doblez sobre si misma, la figura 26 puede ser obtenida al doblar sobre si misma la estructura de bandas en la celda original (figura 27).

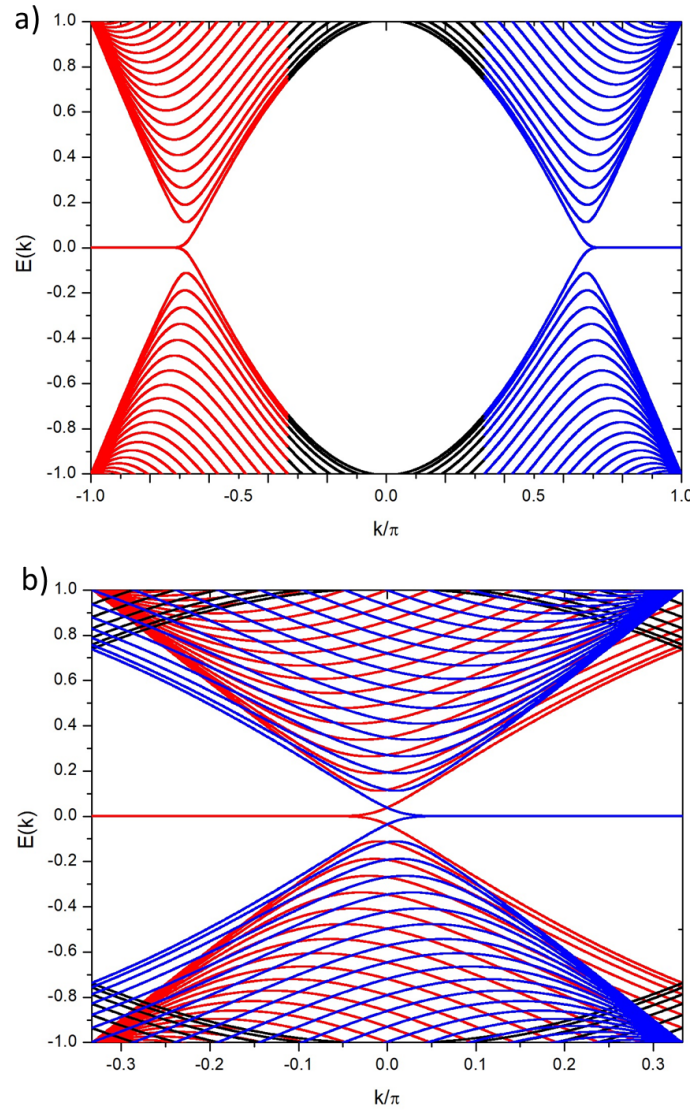


Figura 27: a) Estructura de bandas original para nanocintas zigzag. b) Dobleces de la estructura de bandas original que recrea la estructura de bandas en la nueva zona de Brillouin.

Para la estructura de bandas en la celda aumentada se normalizo con el vector primitivo de traslación de la celda original para recalcar que esta tiene una zona de Brillouin de un tercio del tamaño de la original.

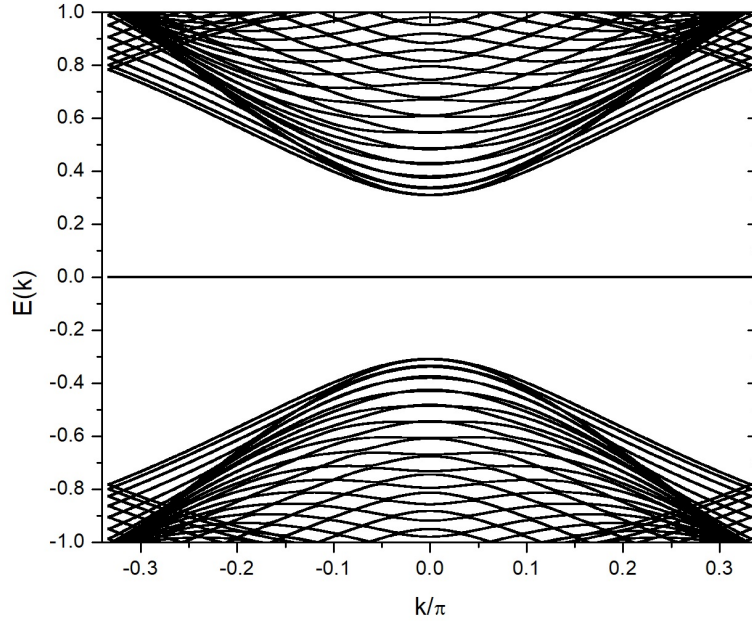


Figura 28: Estructura de bandas de nanocinta zigzag con textura Kek-O. Aparece un gran gap como es de esperarse, pero además aparece una banda plana a consecuencia del corte zigzag.

En las nanocintas zigzag al aplicar la textura Kek-O se abre un gap (figura 28), pero a consecuencia de este tipo de corte existe un estado de borde al nivel de la energía de Fermi, sin embargo, por ser una banda plana el estado correspondiente está altamente localizado, por lo que el gap efectivo es aun mayor.

La celda primitiva para el caso Kek-Y (figura 29), tiene la misma forma que la de la textura Kek-O, por lo que la zona de Brillouin es idéntica. De la figura 30a parece que esta textura no tiene efecto alguno sobre la estructura de bandas más que cambiar unos cruces por anti-cruces, pero al analizar con más detalle se puede encontrar que para las nanocintas zigzag esta textura tiene el efecto de abrir un par

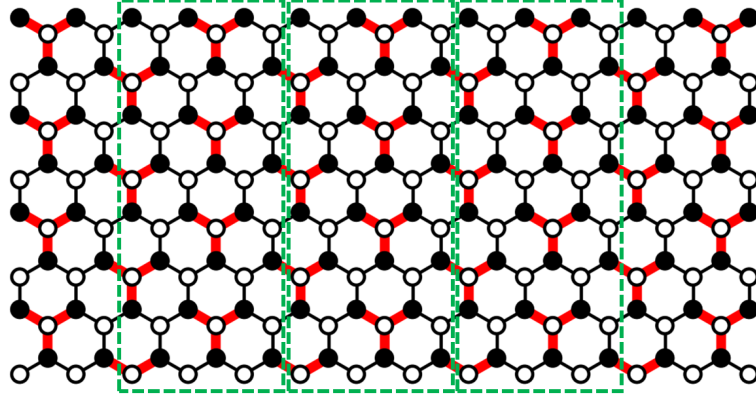


Figura 29: Celda primitiva para nanocintas zigzag con textura Kek-Y.

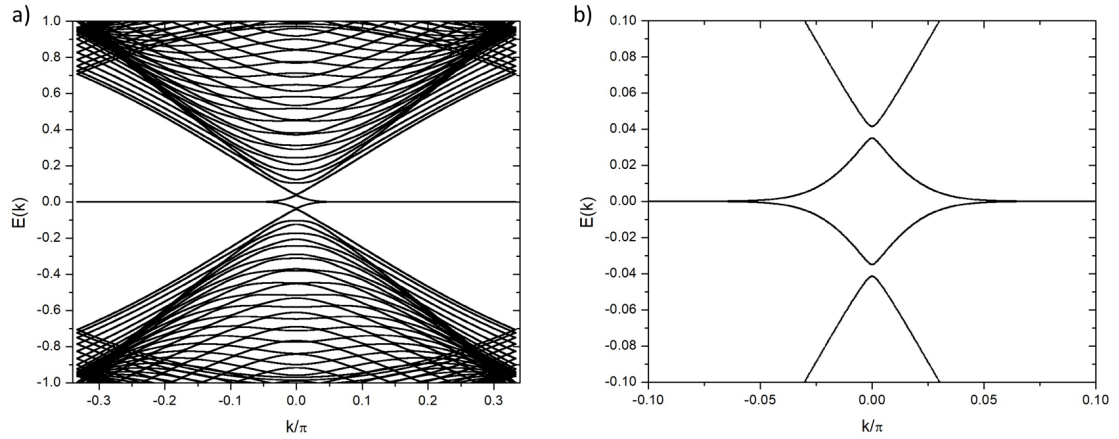


Figura 30: a) Estructura de bandas de nanocintas zigzag con textura Kek-Y. b) Gaps emergentes de la textura Kek-Y en nanocintas zigzag alrededor de la energía de Fermi.

de pequeños gaps de unos cuantos meV al rededor de la energía de Fermi como lo muestra la figura 30b. Lo notable de esto es que en general es mucho mas fácil abrir un gap en el corte *armchair* y la figura 24 mostró que en ese caso no se abre uno por efecto de esta textura. En la figura 31 procedemos a graficar la conductancia en función de la energía para el mismo sistema que el de la figura 30, aquí se muestra como no hay estados disponible en el rango de energías de estos gaps.

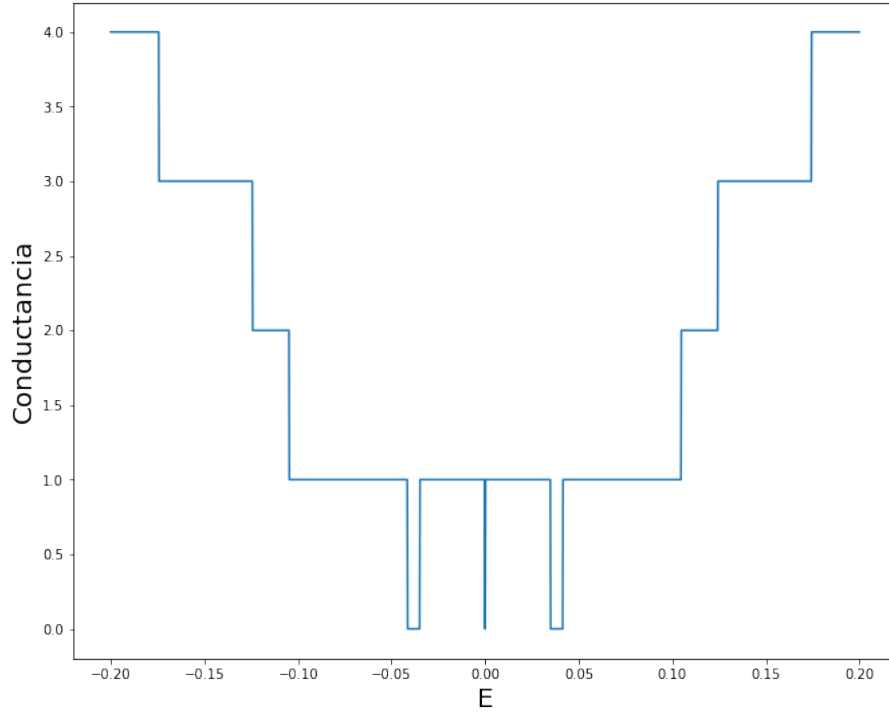


Figura 31: Conductancia (en unidades de $\frac{e^2}{h}$) en función de la energía para nanocinta zigzag con textura Kek-Y. Como es de esperarse se tiene conductancia cero en los valores de energía correspondientes a los gaps.

Se analizó el tamaño del gap en función del ancho de la nanocinta para distintos valores de Δ (figura 32), se encontró que el gap disminuye entre mas ancha sea la nanocinta, como es de esperarse ya que transversalmente el sistema es como un pozo de paredes infinitas cuyas energías son inversamente proporcionales al ancho. Como el gap aumenta entre mayor sea Δ , también se realizó una gráfica del tamaño del gap en función de este parámetro para distintos anchos (figura 33).

En el caso de la figura 33 el gap aumenta de manera lineal para valores de Δ pequeños. Por lo que variando tanto el parámetro del ancho como de la fuerza del acoplamiento se podría hacer ingeniería del gap para obtener valores específicos que sean favorables para aplicaciones electrónicas.

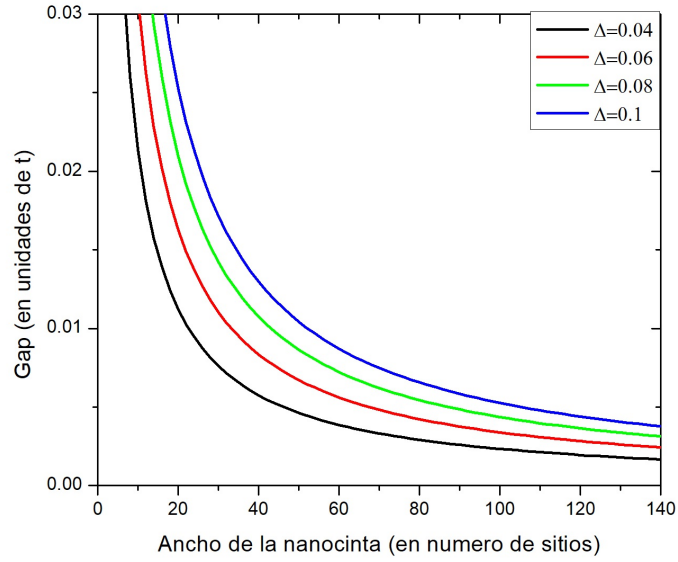


Figura 32: Tamaño del gap en función del ancho de la nanocinta, para distintos valores de amplitud de acoplamiento Kekulé.

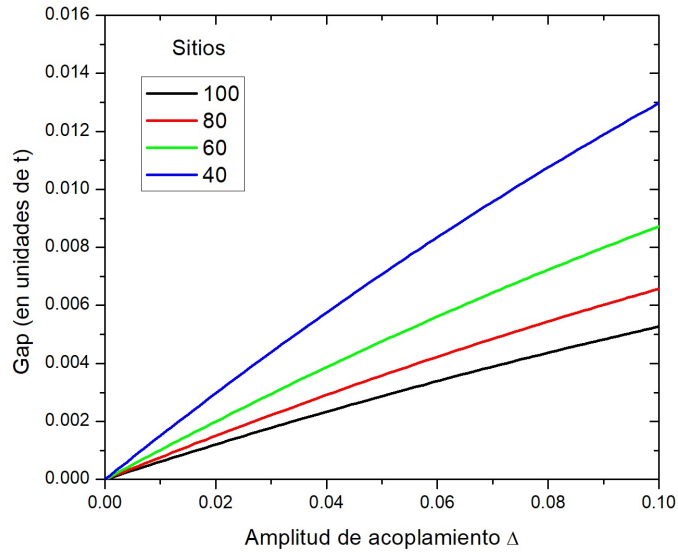


Figura 33: Tamaño del gap en función de amplitud de acoplamiento Kekulé considerado para distintos valores del ancho de la nanocinta (en número de sitios).

Para descartar la posibilidad de que la aparición de este gap fuera resultado de un error numérico y además para caracterizarlo mas profundamente se procedió a

realizar el cálculo analítico de la estructura de bandas dentro de la aproximación de bajas energías con el método mostrado por Wakabayashi et al. (2010). El desarrollo puede encontrarse en el apéndice A, en el cual se llega al resultado siguiente,

$$E_{Gap} = \frac{\hbar v_0 \pi \Delta}{L}, \quad (29)$$

de este resultado podemos observar de manera explícita la dependencia con la amplitud de acoplamiento Δ es lineal en esta aproximación, por lo que en la figura 34 procedemos a graficar las rectas correspondientes a cada una de las gráficas de la figura 33. De manera análoga en la figura 34 realizamos una gráfica del tamaño del gap en función del ancho de la nanocinta, que compara los valores obtenidos analíticamente con los resultados numéricos de la figura 32.

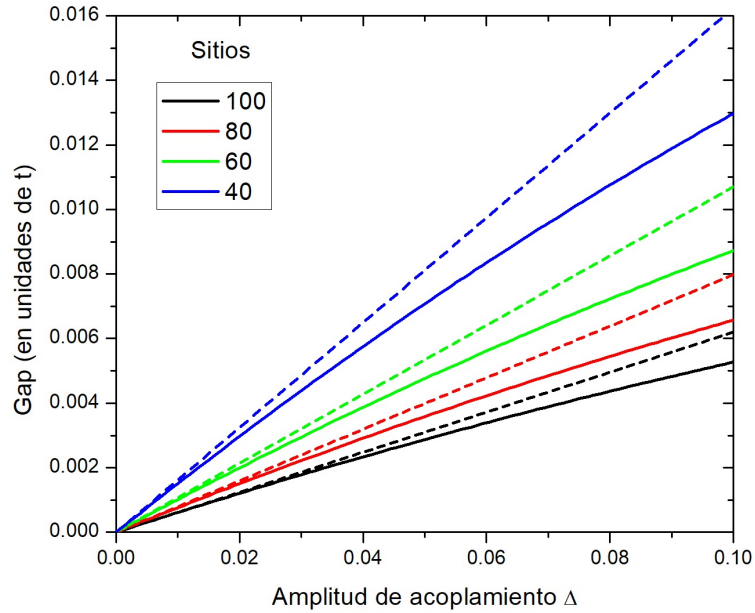


Figura 34: Comparación de resultado analítico en la aproximación de bajas energías (líneas punteadas) y resultado numérico (líneas sólidas) del tamaño del gap en función de la amplitud de acoplamiento para distintos anchos de nanocinta.

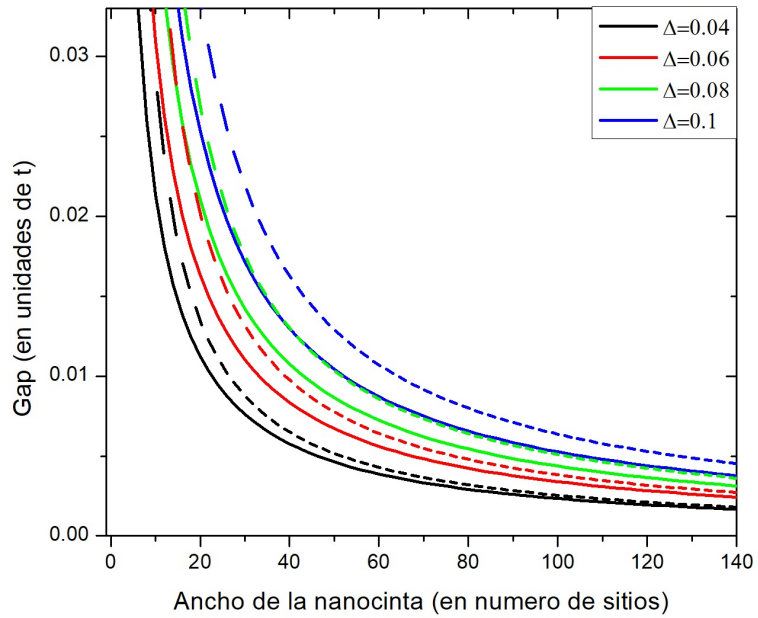


Figura 35: Comparación de resultado analítico en la aproximación de bajas energías (líneas punteadas) y resultado numérico (líneas solidas) del tamaño del gap en función del ancho de la nanocinta para distintos valores de acoplamiento Kekulé.

Los resultados indican una gran similitud a valores pequeños de Δ , esto tiene sentido ya que en la aproximación realizada se desprecian términos de Δ de orden superior. Aun así esta aproximación es aceptable ya que a regímenes mayores se comienza a perder el significado físico de esta distorsión debido a que se comienza a crear una molecularización de los átomos de carbono, además, tanto en la figura 34 como en la figura 35 se observa como entre mayor sea el número de sitios en el ancho se tiene una mayor congruencia entre los datos.

6. Conclusiones

En conclusión, hemos obtenido de manera numérica la estructura de bandas para distorsiones Kek-O y Kek-Y presentes tanto en grafeno infinito como en nanocintas de grafeno en las dos direcciones de corte principal zigzag y *armchair*. La textura Kek-O tiene sin duda la capacidad de abrir un gap de tamaño considerable en cualquiera de los sistemas presentados. Por otra parte originalmente se creía que la textura Kek-Y no tenía el efecto de abrir un gap si no de alinear el grado de libertad de valle con el momento como mostró Gamayun et al. (2018), sin embargo, esto junto con los efectos del corte de nanocinta en zigzag lograron abrir un pequeño par de gaps, los cuales fueron comprobados de manera analítica utilizando una aproximación a bajas energías que trae consigo una restricción de pequeñas amplitudes de acoplamiento Kekulé, y de hecho es bastante buena en este régimen que es el que realmente importa ya que a amplitudes mayores se comienza a perder el significado físico de la distorsión dejando segmentos moleculares en la red de grafeno.

Varios de los sistemas presentados aquí tienen gaps de distintas formas y tamaños dependiendo de el tipo de corte, la textura Kekulé empleada, el ancho de la nanocinta, y la amplitud de distorsión, variar este último parámetro es lo que podría complicar su fabricación ya que dependería de la especie de átomos adsorbidos empleados, aunque por otro lado la robustez a condiciones ambientales hace que valga la pena intentar producir dispositivos electrónicos de grafeno con textura Kekulé.

Apéndices

A. Cálculo analítico del tamaño del gap dentro de la aproximación de bajas energías

Dentro de la aproximación de bajas energías para textura Kek-Y la ecuación de Dirac correspondiente es,

$$\mathcal{H}\Psi = E\Psi, \quad (30a)$$

con el hamiltoniano dado por la ecuación (25c) con $\nu=1$,

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} 0 & -v_0(P_x - iP_y) & -\Delta v_0(P_x - iP_y) & 0 \\ -v_0(P_x + iP_y) & 0 & 0 & \Delta v_0(P_x - iP_y) \\ -\Delta v_0(P_x + iP_y) & 0 & 0 & v_0(P_x - iP_y) \\ 0 & \Delta v_0(P_x + iP_y) & v_0(P_x + iP_y) & 0 \end{pmatrix} \quad (30b)$$

y el espinor asociado es,

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi'_B(x, y) \\ \psi'_A(x, y) \\ \psi_A(x, y) \\ \psi_B(x, y) \end{pmatrix}. \quad (30c)$$

Aplicando separación de variable y tomando el eje x orientado paralelamente a la nanocinta se puede escribir la dependencia en x como partícula libre,

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi'_B(y) \\ \phi'_A(y) \\ \phi_A(y) \\ \phi_B(y) \end{pmatrix} e^{ik_x x}, \quad (31)$$

sustituyendo este tipo de soluciones en (30a) se obtienen cuatro ecuaciones,

$$\epsilon\phi_A = (k_x - \partial_y)\phi_B - \Delta(k_x + \partial_y)\phi'_B, \quad (32a)$$

$$\epsilon\phi_B = (k_x + \partial_y)\phi_A + \Delta(k_x + \partial_y)\phi'_A, \quad (32b)$$

$$\epsilon\phi'_A = -(k_x + \partial_y)\phi'_B + \Delta(k_x - \partial_y)\phi_B, \quad (32c)$$

$$\epsilon\phi'_B = -(k_x - \partial_y)\phi'_A - \Delta(k_x - \partial_y)\phi_A, \quad (32d)$$

con $\epsilon = E/\hbar v_0$.

Multiplicando (32b) y (32d) por $(k_x - \partial_y)$ y $(k_x + \partial_y)$ respectivamente,

$$\epsilon(k_x - \partial_y)\phi_B = (k_x^2 - \partial_y^2)(\phi_A + \Delta\phi'_A), \quad (33a)$$

$$\epsilon(k_x + \partial_y)\phi'_B = -(k_x^2 - \partial_y^2)(\phi'_A + \Delta\phi_A), \quad (33b)$$

utilizando (33a) y (33b) en (32a),

$$\begin{aligned} \epsilon^2\phi_A &= (k_x^2 - \partial_y^2)(\phi_A + \Delta\phi'_A) + \Delta(k_x^2 - \partial_y^2)(\phi'_A + \Delta\phi_A) \\ &= (k_x^2 - \partial_y^2)[(1 + \Delta^2)\phi_A + 2\Delta\phi'_A], \end{aligned} \quad (34)$$

reacomodando términos,

$$(\epsilon^2 - (1 + \Delta^2)(k_x^2 - \partial_y^2))\phi_A = 2\Delta(k_x^2 - \partial_y^2)\phi'_A, \quad (35)$$

de manera similar, utilizando (33a) y (33b) en (32c),

$$(\epsilon^2 - (1 + \Delta^2)(k_x^2 - \partial_y^2))\phi'_A = 2\Delta(k_x^2 - \partial_y^2)\phi_A, \quad (36)$$

multiplicando (35) por $[\epsilon^2 - (1 + \Delta^2)(k_x^2 - \partial_y^2)]$,

$$(\epsilon^2 - (1 + \Delta^2)(k_x^2 - \partial_y^2))^2\phi_A = 2\Delta(k_x^2 - \partial_y^2)(\epsilon^2 - (1 + \Delta^2)(k_x^2 - \partial_y^2))\phi'_A, \quad (37)$$

aplicando (36) en el lado derecho de (37) podemos desacoplar los términos y obtener una ecuación que solo depende de ϕ_A ,

$$\begin{aligned} (\epsilon^2 - (1 + \Delta^2)(k_x^2 - \partial_y^2))^2\phi_A &= 2\Delta(k_x^2 - \partial_y^2)(2\Delta(k_x^2 - \partial_y^2)\phi_A) \\ &= 4\Delta^2(k_x^2 - \partial_y^2)^2\phi_A, \end{aligned} \quad (38)$$

reacomodando la ecuación,

$$\begin{aligned} (1 - \Delta^2)^2\partial_y^4\phi_A + (2\epsilon^2(1 + \Delta^2) - 2(1 - \Delta^2)^2k_x^2)\partial_y^2\phi_A \\ + (\epsilon^4 - 2\epsilon^2(1 + \Delta^2)k_x^2 + (1 - \Delta^2)^2k_x^4)\phi_A = 0, \end{aligned} \quad (39)$$

esta ecuación diferencial tiene soluciones del tipo,

$$\phi_A(y) = Ae^{\lambda y}. \quad (40)$$

Para encontrar λ es necesario encontrar las raíces del siguiente polinomio,

$$(1 - \Delta^2)^2 \lambda^4 + (2\epsilon^2(1 + \Delta^2) - 2(1 - \Delta^2)^2 k_x^2) \lambda^2 + (\epsilon^4 - 2\epsilon^2(1 + \Delta^2) k_x^2 + (1 - \Delta^2)^2 k_x^4) = 0. \quad (41)$$

Las soluciones son,

$$\lambda = \pm \lambda_+, \quad \pm \lambda_-, \quad (42)$$

donde,

$$\lambda_{\pm} = \sqrt{k_x^2 - \frac{\epsilon^2}{(1 \pm \Delta)^2}}, \quad (43)$$

por lo que la solución de esta componente de la función de onda es:

$$\phi_A(y) = Ae^{\lambda-y} + Be^{-\lambda-y} + Ce^{\lambda+y} + De^{-\lambda+y}. \quad (44)$$

Para encontrar ϕ'_A sustituimos (44) en (35),

$$\begin{aligned} (k_x^2 - \partial_y^2) \phi'_A &= -\frac{\epsilon^2}{(1 - \Delta)^2} Ae^{\lambda-y} - \frac{\epsilon^2}{(1 - \Delta)^2} Be^{-\lambda-y} + \frac{\epsilon^2}{(1 + \Delta)^2} Ce^{\lambda+y} + \frac{\epsilon^2}{(1 + \Delta)^2} De^{-\lambda+y} \\ &= -(k_x^2 - \lambda_-^2) Ae^{\lambda-y} - (k_x^2 - \lambda_-^2) Be^{-\lambda-y} + (k_x^2 - \lambda_+^2) Ce^{\lambda+y} + (k_x^2 - \lambda_+^2) De^{-\lambda+y} \\ &= (k_x^2 - \partial_y^2) (-Ae^{\lambda-y} - Be^{-\lambda-y} + Ce^{\lambda+y} + De^{-\lambda+y}), \end{aligned} \quad (45)$$

de esta ecuación se puede observar que,

$$\phi'_A(y) = -Ae^{\lambda-y} - Be^{-\lambda-y} + Ce^{\lambda+y} + De^{-\lambda+y}. \quad (46)$$

Ahora podemos utilizar las funciones de onda ϕ_A y ϕ'_A para encontrar ϕ_B y ϕ'_B ,

utilizándolas en (32b) y (32d) respectivamente,

$$\begin{aligned}
\epsilon\phi_B &= (k_x + \partial_y)(Ae^{\lambda-y} + Be^{-\lambda-y} + Ce^{\lambda+y} + De^{-\lambda+y}) \\
&\quad + \Delta(k_x + \partial_y)(-Ae^{\lambda-y} - Be^{-\lambda-y} + Ce^{\lambda+y} + De^{-\lambda+y}), \\
\epsilon\phi_B &= (1 - \Delta)(k_x + \lambda_-)Ae^{\lambda-y} + (1 - \Delta)(k_x - \lambda_-)Be^{-\lambda-y} \\
&\quad + (1 + \Delta)(k_x + \lambda_+)Ce^{\lambda+y} + (1 + \Delta)(k_x - \lambda_+)De^{-\lambda+y},
\end{aligned} \tag{47}$$

$$\begin{aligned}
\epsilon\phi'_B &= -(k_x - \partial_y)(-Ae^{\lambda-y} - Be^{-\lambda-y} + Ce^{\lambda+y} + De^{-\lambda+y}) \\
&\quad - \Delta(k_x - \partial_y)(Ae^{\lambda-y} + Be^{-\lambda-y} + Ce^{\lambda+y} + De^{-\lambda+y}), \\
\epsilon\phi'_B &= (1 - \Delta)(k_x - \lambda_-)Ae^{\lambda-y} + (1 - \Delta)(k_x + \lambda_-)Be^{-\lambda-y} \\
&\quad - (1 + \Delta)(k_x - \lambda_+)Ce^{\lambda+y} - (1 + \Delta)(k_x + \lambda_+)De^{-\lambda+y},
\end{aligned} \tag{48}$$

de manera que las cuatro soluciones son:

$$\phi_A(y) = Ae^{\lambda-y} + Be^{-\lambda-y} + Ce^{\lambda+y} + De^{-\lambda+y}, \tag{49a}$$

$$\phi'_A(y) = -Ae^{\lambda-y} - Be^{-\lambda-y} + Ce^{\lambda+y} + De^{-\lambda+y}, \tag{49b}$$

$$\begin{aligned}
\phi_B(y) &= \frac{1}{\epsilon}[(1 - \Delta)(k_x + \lambda_-)Ae^{\lambda-y} + (1 - \Delta)(k_x - \lambda_-)Be^{-\lambda-y} \\
&\quad + (1 + \Delta)(k_x + \lambda_+)Ce^{\lambda+y} + (1 + \Delta)(k_x - \lambda_+)De^{-\lambda+y}],
\end{aligned} \tag{49c}$$

$$\begin{aligned}
\phi'_B(y) &= \frac{1}{\epsilon}[(1 - \Delta)(k_x - \lambda_-)Ae^{\lambda-y} + (1 - \Delta)(k_x + \lambda_-)Be^{-\lambda-y} \\
&\quad - (1 + \Delta)(k_x - \lambda_+)Ce^{\lambda+y} - (1 + \Delta)(k_x + \lambda_+)De^{-\lambda+y}].
\end{aligned} \tag{49d}$$

Procedemos a aplicar las condiciones de frontera tal que la función de onda se

anule en los bordes de la nanocinta, es decir, para una nanocinta de ancho L , colocando el borde inferior de la nanocinta en $y = 0$ compuesto de sitios de la subred B, se traduce en $\phi_A(L) = \phi'_A(L) = \phi_B(0) = \phi'_B(0) = 0$, ilustradas en la figura 36.

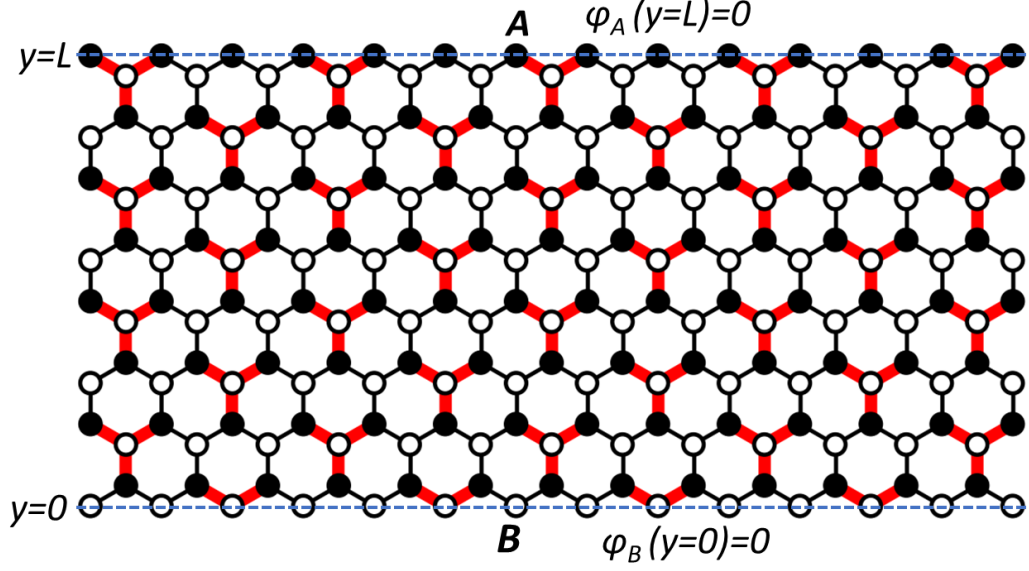


Figura 36: Condiciones de frontera para nanocintas zigzag. La función de onda debe anularse en las fronteras $y = 0$ y $y = L$, por lo que $\phi_A(L) = \phi'_A(L) = \phi_B(0) = \phi'_B(0) = 0$.

$$\phi_A(L) = Ae^{\lambda-L} + Be^{-\lambda-L} + Ce^{\lambda+L} + De^{-\lambda+L} = 0, \quad (50a)$$

$$\phi'_A(L) = -Ae^{\lambda-L} - Be^{-\lambda-L} + Ce^{\lambda+L} + De^{-\lambda+L} = 0, \quad (50b)$$

$$\begin{aligned} \phi_B(0) = \frac{1}{\epsilon} & [(1 - \Delta)(k_x + \lambda_-)A + (1 - \Delta)(k_x - \lambda_-)B \\ & + (1 + \Delta)(k_x + \lambda_+)C + (1 + \Delta)(k_x - \lambda_+)D] = 0, \end{aligned} \quad (50c)$$

$$\begin{aligned} \phi'_B(0) = \frac{1}{\epsilon} & [(1 - \Delta)(k_x - \lambda_-)A + (1 - \Delta)(k_x + \lambda_-)B \\ & - (1 + \Delta)(k_x - \lambda_+)C - (1 + \Delta)(k_x + \lambda_+)D] = 0, \end{aligned} \quad (50d)$$

por lo que obtenemos un sistema de ecuaciones, que procedemos a resolver igualando a cero el determinante de su representación matricial,

$$\begin{vmatrix} e^{\lambda_- L} & e^{-\lambda_- L} & e^{\lambda_+ L} & e^{-\lambda_+ L} \\ -e^{\lambda_- L} & -e^{-\lambda_- L} & e^{\lambda_+ L} & e^{-\lambda_+ L} \\ (1 - \Delta)(k_x + \lambda_-) & (1 - \Delta)(k_x - \lambda_-) & (1 + \Delta)(k_x + \lambda_+) & (1 + \Delta)(k_x - \lambda_+) \\ (1 - \Delta)(k_x - \lambda_-) & (1 - \Delta)(k_x + \lambda_-) & -(1 + \Delta)(k_x - \lambda_+) & -(1 + \Delta)(k_x + \lambda_+) \end{vmatrix} = 0, \quad (51)$$

lo cual nos lleva a,

$$(e^{2L\lambda_-} + 1)(e^{2L\lambda_+} + 1)\lambda_+\lambda_- = (e^{2L\lambda_-} - 1)(e^{2L\lambda_+} - 1)k_x^2 \quad (52)$$

que puede expresarse como sigue,

$$\text{Tanh}(\lambda_+ L)\text{Tanh}(\lambda_- L) = \frac{\lambda_+\lambda_-}{k_x^2}, \quad (53)$$

cada una de las soluciones de esta ecuación nos da una relación de E con k_x equivalente a una banda de la relación de dispersión.

Dado que nuestro interés son los gaps tomamos $k_x = 0$ ya que ahí es donde se encuentran, al hacer esto tenemos,

$$\text{Cosh}(\lambda_+ L)\text{Cosh}(\lambda_- L)\lambda_+\lambda_- = 0, \quad (54)$$

$$\lambda_{\pm} = i \frac{\epsilon}{1 \pm \Delta}, \quad (55)$$

dado que $\lambda_{\pm} \neq 0$, la ecuación (54) se reduce a

$$\begin{aligned} \text{Cosh}(\lambda_+ L) \text{Cosh}(\lambda_- L) &= 0, \\ \Rightarrow \lambda_{\pm} &= i \frac{\pi}{2L}, \end{aligned} \quad (56)$$

donde solo se tomo la primer solución ya que estamos considerando bajas energías, igualando la ecuación (55) y (56),

$$\epsilon_{\pm} = (1 \pm \Delta) \frac{\pi}{2L}, \quad (57)$$

recordando que $E = \hbar v_0 \epsilon$

$$E_{\pm} = (1 \pm \Delta) \frac{\hbar v_0 \pi}{2L}, \quad (58)$$

aquí se puede observar como hay dos niveles de energía ligeramente separados formando un gap, por lo que,

$$E_{Gap} = E_+ - E_- = \frac{\hbar v_0 \pi \Delta}{L}. \quad (59)$$

B. Ejemplo del cálculo de estructura de bandas utilizando el paquete kwant para python

```
9 #Importar paquetes
10 import kwant
11 import matplotlib.pyplot as pyplot
12 import numpy as np
13
14 #Definir la red de grafeno con seis atomos por celda primitiva
15 KekGraphene = kwant.lattice.general(
16 #Vectores de red
17 [(0,3), (3*np.sqrt(3)/2, 3/2)],
18 #Posición de los 6 atomos de la celda primitiva
19 [(0,1), (np.sqrt(3)/2, 1/2), (np.sqrt(3)/2, -1/2), (0,-1),
20 (-np.sqrt(3)/2, -1/2), (-np.sqrt(3)/2, 1/2)])
21
22 A, B, C, D, E, F = KekGraphene.sublattices
23
24 lat = KekGraphene
25
26 #Ancho de la nanocinta
27 W = 60
28 #Amplitud de acoplamiento Kekulé
29 Delta = 0.1
30
31 #Crear la nanocinta
32 Ribbon = kwant.Builder(kwant.TranslationalSymmetry([3*np.sqrt(3),0]))
33 Ribbon[lat.wire((0,0),W/2)]=0
34 #Definir las amplitudes de transmisión con Kek-Y
35 Ribbon[lat.neighbors()] = -1+Delta
36 Ribbon[kwant.builder.HoppingKind((0, 0), D, E)] = -1-2*Delta
37 Ribbon[kwant.builder.HoppingKind((0, 0), D, C)] = -1-2*Delta
38 Ribbon[kwant.builder.HoppingKind((1, 0), D, A)] = -1-2*Delta
39 Ribbon = Ribbon.finalized();
40
41 #Ajustar tamaño de la gráfica
42 fig_size = pyplot.rcParams["figure.figsize"]
43 fig_size[0] = 15
44 fig_size[1] = 12
45 pyplot.rcParams["figure.figsize"] = fig_size
46
47 #Graficar la estructura de bandas
48 kwant.plotter.bands(Ribbon,show=False)
49 pyplot.axis([-3.18, 3.18, -1, 1]);
50 pyplot.title('Estructura de Bandas de Nanocinta ZZ con Textura Kek-Y')
pyplot.show();
```

Figura 37: Código escrito en python utilizando el paquete Kwant para la estructura de bandas de las nanocintas zigzag con textura Kek-Y.

El código de la figura 37 puede ser fácilmente modificado para el caso de la textura

Kek-O, solo es necesario modificar las líneas de la 36 a la 38 para ajustar cuales son los enlaces que aumentan su fuerza debido a la distorsión Kekulé. La salida del código se muestra en la figura 38 que es congruente con la misma gráfica realizada en fortran mostrada en la figura 30a.

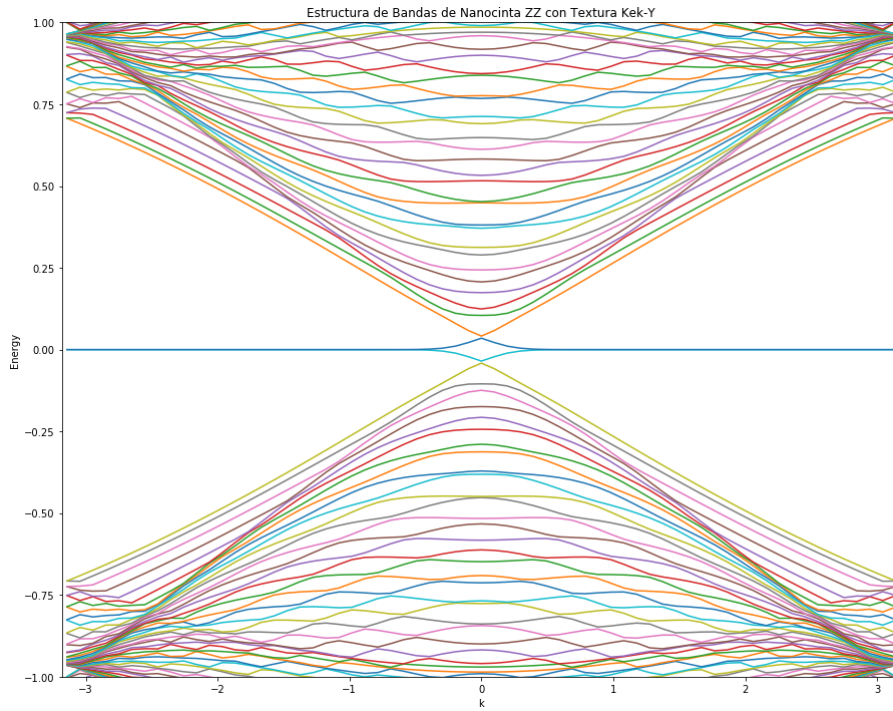


Figura 38: Salida del código para nanocinta zigzag con textura Kek-Y realizado en python con el paquete kwant.

Referencias

- Balandin, A. A., Ghosh, S., Bao, W., Calizo, I., Teweldebrhan, D., Miao, F., and Lau, C. N. (2008). Superior thermal conductivity of single-layer graphene. *Nano letters*, 8(3):902–907.
- Bischoff, D., Varlet, A., Simonet, P., Eich, M., Overweg, H. C., Ihn, T., and Ensslin, K. (2015). Localized charge carriers in graphene nanodevices. *Applied Physics Reviews*, 2(3):031301.
- Bloch, F. (1929). Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. *Zeitschrift für physik*, 52(7-8):555–600.
- Booth, T. J., Blake, P., Nair, R. R., Jiang, D., Hill, E. W., Bangert, U., Bleloch, A., Gass, M., Novoselov, K. S., Katsnelson, M. I., et al. (2008). Macroscopic graphene membranes and their extraordinary stiffness. *Nano letters*, 8(8):2442–2446.
- Chamon, C. (2000). Solitons in carbon nanotubes. *Physical Review B*, 62(4):2806.
- Cheianov, V., Fal'ko, V., Syljuåsen, O., and Altshuler, B. (2009). Hidden kekulé ordering of adatoms on graphene. *Solid State Communications*, 149(37-38):1499–1501.
- Datta, S. (2005). *Quantum transport: atom to transistor*. Cambridge university press.
- Fujita, M., Wakabayashi, K., Nakada, K., and Kusakabe, K. (1996). Peculiar localized state at zigzag graphite edge. *Journal of the Physical Society of Japan*, 65(7):1920–1923.
- Gamayun, O., Ostroukh, V., Gnezdilov, N., Adagideli, I., and Beenakker, C. W.

- (2018). Valley-momentum locking in a graphene superlattice with y-shaped kekulé bond texture. *New Journal of Physics*.
- Geim, A. K. (2009). Graphene: status and prospects. *science*, 324(5934):1530–1534.
- Groth, C. W., Wimmer, M., Akhmerov, A. R., and Waintal, X. (2014). Kwant: a software package for quantum transport. *New Journal of Physics*, 16(6):063065.
- Gutiérrez, C., Kim, C.-J., Brown, L., Schiros, T., Nordlund, D., Lochocki, E. B., Shen, K. M., Park, J., and Pasupathy, A. N. (2016). Imaging chiral symmetry breaking from kekulé bond order in graphene. *Nature Physics*, 12(10):950.
- Hou, C.-Y., Chamon, C., and Mudry, C. (2007). Electron fractionalization in two-dimensional graphenelike structures. *Physical review letters*, 98(18):186809.
- Jones, W. and March, N. H. (1973). *Theoretical solid state physics: Perfect lattices in equilibrium*, volume 1. Courier Corporation.
- Kariyado, T., Hu, X., and Hu, X. (2017). Topological states characterized by mirror winding numbers in graphene with bond modulation. *Scientific reports*, 7(1):16515.
- Kittel, C. and Fong, C.-y. (1963). *Quantum theory of solids*, volume 3. Wiley New York.
- Lee, C., Wei, X., Kysar, J. W., and Hone, J. (2008). Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *science*, 321(5887):385–388.
- Lin, Z., Qin, W., Zeng, J., Chen, W., Cui, P., Cho, J.-H., Qiao, Z., and Zhang, Z. (2017). Competing gap opening mechanisms of monolayer graphene and graphene nanoribbons on strong topological insulators. *Nano letters*, 17(7):4013–4018.

- Liu, F., Yamamoto, M., and Wakabayashi, K. (2017). Topological edge states of honeycomb lattices with zero berry curvature. *Journal of the Physical Society of Japan*, 86(12):123707.
- Nair, R. R., Blake, P., Grigorenko, A. N., Novoselov, K. S., Booth, T. J., Stauber, T., Peres, N. M., and Geim, A. K. (2008). Fine structure constant defines visual transparency of graphene. *Science*, 320(5881):1308–1308.
- Neto, A. C., Guinea, F., and Peres, N. M. (2006). Drawing conclusions from graphene. *Physics World*, 19(11):33.
- Neto, A. C., Guinea, F., Peres, N. M., Novoselov, K. S., and Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. *Reviews of modern physics*, 81(1):109.
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., Grigorieva, I. V., and Firsov, A. A. (2004). Electric field effect in atomically thin carbon films. *science*, 306(5696):666–669.
- Peres, N. (2009). The transport properties of graphene. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(32):323201.
- Wakabayashi, K., Sasaki, K.-i., Nakanishi, T., and Enoki, T. (2010). Electronic states of graphene nanoribbons and analytical solutions. *Science and technology of advanced materials*, 11(5):054504.
- Wallace, P. R. (1947). The band theory of graphite. *Physical Review*, 71(9):622.