

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA
FACULTAD DE CIENCIAS



LICENCIATURA EN FÍSICA

**“SISTEMAS DE DIRAC BAJO RADIACIÓN
ELECTROMAGNÉTICA”**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

FÍSICO

P R E S E N T A:

MIGUEL ABRAHAM MOJARRO RAMÍREZ

Director de Tesis:

Dr. Ramón Carrillo Bastos

Codirector de Tesis:

Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdova

Ensenada, Baja California, México, junio de 2021

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA
FACULTAD DE CIENCIAS

SISTEMAS DE DIRAC BAJO RADIACIÓN ELECTROMAGNÉTICA

T E S I S P R O F E S I O N A L

QUE PRESENTA

MIGUEL ABRAHAM MOJARRO RAMÍREZ

APROBADO POR:



DR. RAMÓN CARRILLO BASTOS
DIRECTOR



DR. JESÚS ALBERTO MAYTORENA CÓRDOVA
CODIRECTOR



DRA. PRISCILLA ELIZABETH IGLESIAS VÁZQUEZ
SINODAL

A mi familia

Artículos publicados

- **M. A. Mojarro**, R. Carrillo-Bastos, and Jesús A. Maytorena. Optical properties of anisotropic tilted Dirac systems. *Phys. Rev. B*, 103:165415, Apr. 2021.
DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.165415>
- **M. A. Mojarro**, V. G. Ibarra-Sierra, J. C. Sandoval-Santana, R. Carrillo-Bastos, and Gerardo G. Naumis. Dynamical Floquet spectrum of Kekulé-distorted graphene under normal incidence of electromagnetic radiation. *Phys. Rev. B*, 102:165301, Oct. 2020.
DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.165301>
- **M. A. Mojarro**, V. G. Ibarra-Sierra, J. C. Sandoval-Santana, R. Carrillo-Bastos, and Gerardo G. Naumis. Electron transitions for Dirac Hamiltonians with flat bands under electromagnetic radiation: Application to the $\alpha - \mathcal{T}_3$ graphene model. *Phys. Rev. B*, 101:165305, Apr. 2020.
DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.165305>

Resumen de la tesis de **Miguel Abraham Mojarro Ramírez** presentada como requisito parcial para la obtención de la **Licenciatura en Física**. Ensenada, Baja California, México, junio de 2021.

Sistemas de Dirac bajo radiación electromagnética

Los materiales bidimensionales han mostrado ser buenos candidatos para liderar la próxima generación de dispositivos electrónicos dada su baja dimensionalidad y propiedades físicas únicas. En particular, los sistemas de Dirac tales como el grafeno, el borofeno y los aislantes topológicos, por mencionar algunos, son acreedores de propiedades electrónicas bastante exóticas gracias a la naturaleza relativista de los portadores de carga que residen en ellos. Al hacer incidir radiación electromagnética sobre estos sistemas, diversos fenómenos pueden manifestarse dependiendo de la naturaleza de la radiación. En el presente trabajo se consideraron dos escenarios: (1) la manipulación de las propiedades electrónicas utilizando radiación electromagnética de alta frecuencia, y (2) la respuesta a un campo eléctrico dependiente del tiempo en el límite de longitud de onda larga. En el primer caso, se estudiaron los efectos de un campo electromagnético externo sobre la estructura de bandas de grafeno con dos fases posibles de distorsión Kekulé, las texturas Kek-Y y Kek-O. Utilizando la teoría de Floquet, se encontró que la incidencia de luz circularmente polarizada permite controlar las brechas de energía en el punto de Dirac, mientras que al incidir luz linealmente polarizada se observó que los conos de Dirac se vuelven altamente anisotrópicos. Además, para tener un mejor entendimiento de las propiedades electrónicas de este sistema, se estudió la conductividad DC dentro de la teoría de transporte de Boltzmann.

En el segundo caso, se investigaron las propiedades ópticas de sistemas bidimensionales con conos de Dirac inclinados y anisotrópicos, y se estudiaron los efectos de brechas de energía dependientes del valle sobre la respuesta óptica. Se calculó la densidad conjunta de estados en la vecindad de los puntos de Dirac, donde se manifestaron singularidades de van Hove que caracterizan el espectro de energías. Esta misma cantidad permitió anticipar las propiedades espectrales del tensor de conductividad óptica, el cual se calculó dentro del marco de teoría de respuesta lineal.

Además, cálculos de la conductividad longitudinal evidenciaron la anisotropía de la estructura de bandas. Por otro lado, el rompimiento de la simetría de valle dio lugar a una respuesta Hall finita, y se mostró como las conductividades Hall anómala y de valle se comportan de manera similar al caso del grafeno, con modificaciones pronunciadas a causa de la naturaleza indirecta de las brechas de energía en esta clase de sistemas. También, estudios de la transmisión y reflexión revelaron una magnitud de la opacidad óptica en el vacío alrededor de 2.3 %, el cual es el resultado bien conocido del grafeno. Finalmente, se encontró que las rotaciones de la polarización (efectos Kerr y Faraday) alcanzan magnitudes de décimas de radianes en algunos casos.

Palabras clave: **Sistemas de Dirac, teoría de Floquet, propiedades ópticas.**

Resumen aprobado por:



Dr. Ramón Carrillo Bastos

Abstract

Two-dimensional materials have proven to be good candidates to lead the next generation of electronic devices given their low dimensionality and unique physical properties. In particular, Dirac systems such as graphene, borophene, and topological insulators possess quite exotic electronic properties due to the relativistic nature of the charge carriers in them. When these systems are exposed to electromagnetic radiation, various phenomena can manifest depending on the nature of the radiation. In this work, two scenarios were considered: (1) the manipulation of electronic properties using high-frequency electromagnetic radiation, and (2) the response to a time-dependent electric field in the long wavelength limit. In the first case, the effects of an external electromagnetic field on the band structure of graphene with two possible Kekulé distortion phases, namely, the Kek-Y and Kek-O textures, were studied. Using Floquet theory, it was found that with circularly polarized light it is possible to control the energy gaps at the Dirac point, and when linearly polarized light is considered, it was observed that the Dirac cones become highly anisotropic. In addition, to have a better understanding of the electronic properties of this system, the DC conductivity was studied within Boltzmann transport theory.

In the second case, the optical properties of two-dimensional systems with anisotropic tilted Dirac cones were investigated, and the effects of valley-contrasting energy gaps on the optical response were studied. The joint density of states in the vicinity of the Dirac points was calculated, where van Hove singularities that characterize the energy spectrum were manifested. This same quantity allowed us to anticipate the spectral properties of the optical conductivity tensor, which was calculated within the framework of the linear response theory. In addition, longitudinal conductivity calculations highlighted the anisotropy of the band structure. On the other hand, the breaking of the valley symmetry gave rise to a finite Hall response, and it was shown that the anomalous and valley Hall conductivities present graphenelike behavior with characteristic modifications due to the indirect nature of the energy gaps in this class of systems. Also, transmission and reflection studies revealed a magnitude of the optical opacity in vacuum of about 2.3 %, which is the well-known result of graphene. Finally, it was found that the polarization rotations (Kerr and Faraday effects) can reach magnitudes of tenths of radians in some cases.

Índice general

1. Introducción	1
2. Sistemas de Dirac bidimensionales	14
2.1. Grafeno	14
2.1.1. Red hexagonal y descripción de amarre fuerte	16
2.1.2. Fermiones de Dirac sin masa	20
2.2. Grafeno con distorsión Kekulé	23
2.2.1. Hamiltoniano a bajas energías	26
2.3. Sistemas bidimensionales con conos de Dirac inclinados y anisotrópicos	29
2.4. Simetrías en sistemas de Dirac	32
3. Conductividad óptica	37
3.1. Teoría de respuesta lineal y formalismo de Kubo	37
3.1.1. Función respuesta para la conductividad óptica	42
3.2. Conductividad Hall	52
3.3. Ecuación de transporte de Boltzmann	54
3.3.1. Ecuación linealizada: corriente eléctrica	56
3.3.2. Tiempo de relajación	60
4. Grafeno con distorsión Kekulé bajo radiación electromagnética	63
4.1. Espectro de Floquet	63
4.1.1. Excitación con radiación circularmente polarizada	66
4.1.2. Excitación con radiación linealmente polarizada	74
4.2. Conductividad DC	83
5. Propiedades ópticas de sistemas de Dirac anisotrópicos e inclinados	88
5.1. Hamiltoniano a bajas energías	88
5.2. Transiciones ópticas: densidad conjunta de estados	92

5.3. Respuesta óptica lineal: tensor de conductividad	99
5.3.1. Conductividad interbanda	100
5.3.2. Conductividad Hall	104
5.3.3. Respuesta longitudinal	107
5.4. Conductividad Hall anómala y de valle	108
5.5. Dispersión electromagnética	112
5.5.1. Opacidad óptica	116
5.5.2. Rotación de la polarización	118
6. Conclusiones	121
A. Ecuación de Dirac	125
B. Partícula cargada en un campo electromagnético	131
C. Teoría de Floquet	136

Índice de figuras

1.1. Representación de la red hexagonal del grafeno	2
2.1. Configuración electrónica del carbono en el proceso de hibridación sp^2	15
2.2. Ilustración de la red del grafeno y sus orbitales electrónicos	16
2.3. Vectores base y vectores base recíprocos de la red hexagonal	18
2.4. Espectro de energía del grafeno	20
2.5. Comparación entre simulación y experimento de grafeno depositado sobre sustrato de cobre	24
2.6. Red hexagonal de grafeno con distorsión Kekulé	26
2.7. Espectro de energía de grafeno con distorsión Kekulé	27
2.8. Representación de la red del borofeno ortorrómbico $8-Pmmn$	30
4.1. Espectro de Floquet de grafeno con textura Kek-Y bajo radiación circularmente polarizada	71
4.2. Cuasiespectro de energía de grafeno con textura Kek-O bajo radiación circularmente polarizada	75
4.3. Esquemas del espectro de Floquet de grafeno con distorsión Kek-Y bajo radiación linealmente polarizada	80
4.4. Esquema del cuasiespectro de energía de grafeno con distorsión Kek-O bajo la acción de luz linealmente polarizada	83

4.5. Conductividad eléctrica de grafeno con distorsión Kek-Y bajo radiación circularmente polarizada	86
5.1. Espectro de energía de un sistema de Dirac con conos inclinados y anisotrópicos en ausencia de simetría de valle	91
5.2. Banda de conducción en la vecindad del punto K y contornos de Fermi	93
5.3. Densidad conjunta de estados para transiciones en la vecindad del punto K	97
5.4. Densidad conjunta de estados total	99
5.5. Parte real de las componentes en la diagonal de la contribución interbanda del tensor de conductividad	105
5.6. Parte real de la conductividad Hall total	106
5.7. Parte real de la conductividad longitudinal	108
5.8. Conductividad Hall anómala	110
5.9. Ilustración del efecto Hall de valle	111
5.10. Esquema del problema de dispersión electromagnética de Fresnel . . .	115
5.11. Opacidad óptica $1 - T(\omega)$ a incidencia normal	117
5.12. Rotaciones de Kerr y Faraday considerando una onda incidente s -polarizada	119

Capítulo 1

Introducción

El carbono se ha convertido en uno de los elementos más estudiados debido a su importancia en áreas como la medicina y la electrónica [1, 2], además de ser importante para el desarrollo de nuevas tecnologías, ya que a través de sus compuestos forma una gran cantidad de materiales que son parte de nuestra vida diaria. Es por eso que la investigación tanto teórica como experimental de toda clase de compuestos de carbono se ha convertido en un área de investigación muy activa.

Una de las formas alotrópicas de carbono que ha llamado la atención en los últimos años es el *grafeno* [3], el cual está constituido por átomos de carbono acomodados de forma hexagonal formando una red bidimensional, tal y como se muestra en la Fig. 1.1. Debido a sus diferentes configuraciones de enlaces posibles, el grafeno da lugar a otras formas alotrópicas de carbono. Por ejemplo, capas superpuestas de grafeno forman grafito, y una capa de grafeno enrollado forma nanotubos, abriendo paso a una nueva familia de materiales con aplicaciones tecnológicas muy prometedoras [4].

En 2004 en Manchester se logró por primera vez el aislamiento de una sola capa

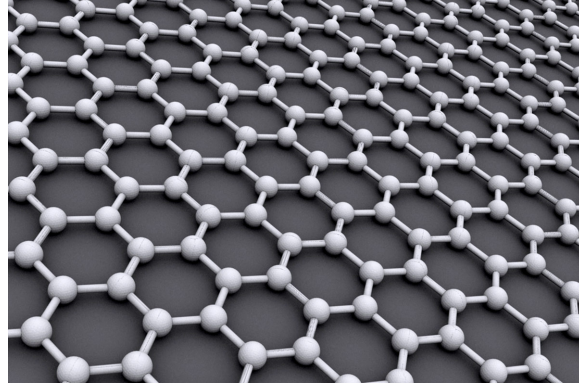


Figura 1.1: Representación de la red hexagonal del grafeno, donde cada nodo corresponde a un átomo de carbono.

de grafeno por un grupo liderado por Andre Geim [5], lo que causó gran interés dentro de la comunidad científica, debido a que los sistemas bidimensionales son buenos candidatos para la fabricación de dispositivos electrónicos más eficientes. Además, actualmente se ha convertido en uno de los materiales más atractivos para su investigación, dado que presenta características que ningún otro material posee. Por ejemplo, se ha comprobado que el grafeno presenta propiedades electrónicas inusuales que pueden ser modificadas externamente [6, 7]. Así, se piensa que en un futuro no muy lejano se cuente con tecnologías a base de grafeno que actualmente son irrealizables con otros materiales.

Las propiedades electrónicas a bajas energías tan exóticas del grafeno surgen como consecuencia de la naturaleza de las cuasipartículas cargadas que residen en este sistema. La dinámica de tales partículas es gobernada por la ecuación de Dirac sin masa de espín $1/2$, con la velocidad de la luz reemplazada por la velocidad de Fermi v_F ($\approx c/300$) [3]. Debido a que la celda unitaria de la red hexagonal está formada por dos átomos de carbono, el espinor asociado a las cuasipartículas tiene dos componentes. Este grado de libertad es conocido como *pseudoespín* (o grado de libertad de subred), ya que se comporta de manera similar al espín real en el espacio

recíproco. Además, gracias a las simetrías presentes en la red hexagonal, la relación de dispersión es lineal alrededor del nivel de Fermi, consistiendo en dos “conos de Dirac” sin brecha de energía, haciendo al grafeno un semimetal. La presencia de dos conos de Dirac en el espectro a bajas energías da lugar a un grado de libertad adicional, frecuentemente conocido como *grado de libertad de valle*, que le confiere al grafeno una gran variedad de interesantes propiedades físicas capaces de ser aplicadas a la nanoelectrónica.

Gracias a las propiedades únicas del grafeno, la búsqueda de otros sistemas en donde los portadores de carga se comportan como fermiones de Dirac sin masa se ha intensificado en los últimos años [8]. Esta clase de sistemas, conocidos ahora como *sistemas de Dirac*, comparten características universales, tales como alta capacidad calorífica, conductividad óptica, y susceptibilidad magnética, por mencionar algunas. La relación de dispersión lineal a bajas energías que caracteriza a un material de Dirac surge esencialmente gracias a la preservación de simetrías en el sistema, tales como la simetría de inversión temporal y la simetría de inversión espacial, dando lugar a la universalidad de sus propiedades físicas y haciéndolos diferentes a los semiconductores o metales convencionales.

Entre los sistemas de Dirac conocidos se encuentra, por ejemplo, el modelo de grafeno $\alpha - \mathcal{T}_3$ [9]. La estructura cristalina de este sistema consiste en la misma red hexagonal de grafeno, con un átomo adicional en el centro de cada hexágono, el cual se acopla a los átomos vecinos de solo una de las subredes, haciendo posible interpolar entre la red de grafeno ($\alpha = 0$) y la red de dados ($\alpha = 1$). Este sistema presenta dos conos de Dirac en su espectro de energía, con una banda plana adicional sobre el nivel de Fermi. Entre los sistemas equivalentes al modelo $\alpha - \mathcal{T}_3$ se encuentra el pozo cuántico $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x$ [10], tricapas [11] y redes ópticas [12]. Gracias a la naturaleza de

este modelo, muchas de sus propiedades físicas pueden ser controladas externamente al variar el parámetro α , tal como la susceptibilidad orbital [9, 13], la transmisión o tunelamiento de Klein [14], y la conductividad óptica [15].

Otro sistema de Dirac recientemente sintetizado es el grafeno con distorsión Kekulé [16]. Este tipo de distorsión consiste en una distribución periódica de enlaces fuertes y débiles en la red de grafeno, lo cual incrementa la celda unitaria con respecto a la celda unitaria de grafeno prístino. Consecuentemente, la zona de Brillouin en el espacio recíproco se dobla hacia el centro, resultando en dos conos de Dirac en el centro de dicha zona. Se ha observado experimentalmente que al colocar epitaxialmente una capa de grafeno sobre sustrato de cobre, aparece una distorsión Kekulé en la red de grafeno, o más precisamente, una distorsión Kek-Y [16]. Este tipo de distorsión se distingue por tener una modificación espacial de enlaces en forma de Y's, con un espectro que consiste en dos conos de Dirac sin brecha energética de distinta velocidad [17]. Otro tipo de distorsión Kekulé conocida es la distorsión Kek-O [18], caracterizada por una distribución de enlaces fuertes y débiles en forma de O's, observada experimentalmente al colocar una hoja de grafeno sobre dióxido de silicio [19], y en grafeno intercalado con litio [18]. El espectro de energía de grafeno con este tipo de distorsión consiste en dos conos degenerados con brecha energética, a diferencia de la distorsión Kek-Y. Se ha llevado a cabo una amplia cantidad de estudios sobre grafeno con distorsión Kekulé, tal como los efectos de deformaciones sobre su espectro energético [20], cálculos de las propiedades electrónicas y de transporte [21, 22, 23, 24], y el efecto sobre la estructura de bandas al considerar interacciones a segundos vecinos [25].

Adicionalmente, existe una familia de sistema de Dirac que presentan un espectro de energía anisotrópico e inclinado, esto es, la velocidad de las cuasipartículas

en estos sistemas depende del ángulo azimutal del momento en el espacio recíproco, y la simetría electrón-hueco no se preserva. Entre estos sistemas se encuentran el borofeno ortorrómbico 8- $Pmmn$ [26, 27], grafeno con distorsión quinoide [28], el semiconductor orgánico α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ [29, 30, 31], dicalcogenuros de metales de transición con estructura 1T' [32, 33], y grafeno parcialmente hidrogenado [34]. El rompimiento de la simetría electrón-hueco y la anisotropía de los conos de Dirac generalmente se ven reflejados en las propiedades ópticas y electrónicas [35], tales como magnetoplasmones [36], la presencia de plasmones anisotrópicos [37], y una conductividad anisotrópica [38].

Cabe señalar que en grafeno prístino siempre existe una conductividad eléctrica mínima a causa de que no hay una separación entre la banda de conducción y la banda de valencia, presentando un obstáculo para su aplicación en dispositivos electrónicos, ya que normalmente se requiere de un control completo sobre el paso o bloqueo de corriente eléctrica. Es por eso que la manipulación de la separación entre ambas bandas de energía es altamente deseable. Se ha observado que un campo electromagnético puede ser utilizado para controlar las propiedades electrónicas del grafeno induciendo transiciones metal-aislante, esto es, es posible manipular el espectro de energía utilizando radiación.

Para el estudio de sistemas de Dirac bajo la acción de un campo electromagnético se utiliza frecuentemente la teoría de Floquet. Esta teoría es una herramienta útil para la investigación de sistemas cuánticos forzados descritos por un hamiltoniano periódico en el tiempo. El uso de campos electromagnéticos a altas frecuencias para controlar sistemas de materia condensada y estructuras atómicas ha dado lugar al campo de estudio conocido como *ingeniería de Floquet* [39]. Dentro de la ingeniería de Floquet, se utiliza luz para controlar propiedades de transporte, electrónicas y

magnéticas, lo cual juega un papel crucial en la fabricación de dispositivos electrónicos, tales como transistores, celdas solares y memorias.

Al irradiar normalmente una capa de grafeno, usualmente suele considerarse una interacción débil entre el campo electromagnético externo y los portadores de carga, de tal modo que la estructura de bandas permanece inalterada. Sin embargo, en el régimen de alta intensidad, el campo electromagnético externo “viste” a los fermiones de Dirac sin masa en grafeno, los cuales se acoplan fuertemente con el campo y se forma un nuevo tipo de cuasipartícula electrón-fotón. Se ha demostrado que es posible abrir una brecha de energía en el espectro si la luz externa se encuentra circularmente polarizada [40]. Por otro lado, si la luz está linealmente polarizada, el espectro permanece sin brecha energética, pero éste adquiere cierta anisotropía, tal que la velocidad de los portadores de carga a lo largo de la polarización excede la velocidad en dirección perpendicular [40, 41]. Además, si la onda electromagnética externa viaja a lo largo del plano de la red, ocurren fenómenos similares [42]. Utilizando la teoría de Floquet, también se ha observado que los efectos combinados de una onda circularmente polarizada y un campo estacionario pueden producir una conductividad Hall estática en grafeno, a pesar de la ausencia de un campo magnético [43].

Adicionalmente, se han estudiado los efectos de una onda electromagnética sobre el espectro de sistemas de Dirac con brechas energéticas, tales como grafeno crecido sobre nitruro de boro y dicalcogenuros de metales de transición [44]. Para el caso de grafeno sobre nitruro de boro, se ha observado que la polarización circular abre o cierra la brecha de energía según su orientación (derecha o izquierda). Además, si en uno de los valles se abre la brecha, en el otro valle se cierra, lo cual permite utilizar luz para tener un control sobre este grado de libertad. Por otro lado, en

dicalcogenuros de metales de transición, tal como MoS_2 , considerando interacción espín-órbita, la separación del espín es drásticamente pronunciada cuando se irradia con luz circularmente polarizada, dependiendo nuevamente del valle. Estos trabajos han demostrado que es posible utilizar radiación electromagnética para controlar brechas de energía y la separación de espín en sistemas de Dirac.

El efecto de campos electromagnéticos sobre la estructura de bandas no solo ha sido estudiado en grafeno, sino también en otros sistemas de Dirac. En el modelo de grafeno $\alpha - \mathcal{T}_3$ [45, 46], por ejemplo, se ha observado que introducir un campo electromagnético con polarización circular a frecuencia alta es equivalente a introducir un término de masa con signos opuestos para cada valle en el hamiltoniano, rompiendo de esta forma la simetría de inversión temporal. Como resultado, se observa que la estructura de bandas depende fuertemente del parámetro α y de los parámetros del campo externo, y que la banda plana se deforma alrededor de los puntos de Dirac, lo cual permite variar las brechas de energía en función de α . Para luz linealmente polarizada, la banda plana permanece invariante, pero los conos de Dirac se vuelven altamente anisotrópicos, haciendo posible modificar dicha anisotropía al variar el parámetro α . Por otro lado, en el régimen de terahertz, las simetrías de valle y de electrón-hueco dejan de preservarse gracias a la dependencia de la fase de Berry con el parámetro α [47].

Los efectos de un campo electromagnético sobre las propiedades electrónicas de sistemas bidimensionales con conos de Dirac inclinados y anisotrópicos, tales como los que se mencionaron anteriormente, también han sido ampliamente estudiados. Por ejemplo, en borofeno $8\text{-}Pmmn$, se ha demostrado que al considerar una onda linealmente polarizada en el límite de campo intenso (o longitud de onda larga), los portadores de carga adquieren una masa dependiente de la dirección de la po-

larización [48]. Además, en el caso de luz elípticamente polarizada, se ha observado que el cuasiespectro adquiere una serie de brechas de energía prohibidas, las cuales dependen de las amplitudes del campo en direcciones perpendiculares (ejes mayores y menores) [49]. Adicionalmente, se han llevado a cabo estudios numéricos del espectro de Floquet de borofeno $8-Pmmn$ a cualquier intensidad del campo externo (linealmente polarizado) [50]. En el límite de campo débil, se observa que el campo externo destruye la anisotropía del espectro de energía, y adquiere una forma similar al espectro de grafeno prístino. En cambio, en el límite de campo intenso, la estructura de bandas adquiere una brecha de energía y permanece altamente anisotrópica. Por otro lado, para luz circularmente polarizada, en ambos casos (campo fuerte y campo débil) se manifiesta una brecha energética en la vecindad de los puntos de Dirac [51].

Otro de los retos importantes al momento de tratar de acceder a las propiedades espectrales de sistemas de Dirac es la dificultad de llevar a cabo experimentos de transporte electrónico, ya que éstos requieren típicamente el uso de contactos. Afortunadamente, es posible acceder a dichas propiedades a través de mediciones de la respuesta óptica, lo cual ofrece una gran ventaja debido a que en experimentos ópticos las muestras a analizar pueden estar libres de contactos. En el caso del grafeno, se han realizado numerosos experimentos utilizando radiación electromagnética que revelan sus características electrónicas [52], los cuales a su vez han evidenciado que las propiedades ópticas del grafeno quedan determinadas por constantes universales, tales como la carga del electrón e , la constante de Planck h , y la constante de estructura fina α ($\approx 1/137$). Gracias a la naturaleza de las cuasipartículas sin masa que residen en la red de grafeno, la bidimensional de la red y el espectro sin brecha de energía, el grafeno tiene la conductividad eléctrica más alta conocida [53]. Se ha

encontrado que la conductividad estática del grafeno a temperaturas bajas y a cero potencial químico alcanza un valor mínimo universal dado por $\sigma_0 = \pi e^2/2h$. Además, experimentos ópticos han revelado un valor universal de la opacidad del grafeno en el vacío a incidencia normal de radiación a frecuencias en el infrarrojo y en el visible dado por $1 - T \approx \pi\alpha = 2.3\%$ [54]. Tal medición ha mostrado ser una prueba contundente del valor universal de la conductividad σ_0 , dando lugar a la universalidad de la transmitancia $T = (1 + 2\pi\sigma_0/c)^{-2}$ y de la reflectancia $R = \pi^2\alpha^2 T/4$ del grafeno.

Una de las propiedades físicas más inmediatas a investigar al momento de que surge un material nuevo es su respuesta a un campo electromagnético externo, tal como la conductividad óptica. La parte real de la conductividad óptica a frecuencia finita está relacionada con la absorción de la energía del fotón incidente, haciendo posible extraer información acerca de la naturaleza y la forma de las bandas de energía a través de la medición de la conductividad. Por ejemplo, trabajos recientes de cálculos de la conductividad óptica del borofeno 8-*Pmmn* utilizando el formalismo de Kubo, han revelado una alta anisotropía en la conductividad, pudiendo de esta forma extraer información sobre la anisotropía en el espectro, o dicho de otra forma, conocer el valor del parámetro que caracteriza la forma inclinada de las bandas de energía [38, 55].

En cuanto a las propiedades ópticas de sistemas de Dirac, el grado de libertad de valle ha mostrado tener consecuencias importantes. Este grado de libertad ha dado lugar a todo un nuevo campo de investigación, conocido como *valletrónica* [56], el cual se encarga del estudio y manipulación de los valles para aplicaciones en dispositivos electrónicos y optoelectrónicos [57], ya que éstos pueden ser controlados externamente para codificar, procesar y almacenar información. Por ejemplo, al aplicar un campo eléctrico en un sistema de Dirac con brecha, los portadores de carga

en diferentes valles se mueven en dirección opuesta y perpendicular a la corriente de deriva, dando lugar a una polarización transversal de valle. A este fenómeno se le conoce comúnmente como *efecto Hall de valle*. En grafeno, al romper la simetría de inversión espacial, aparece una brecha energética en el espectro, dando lugar a una curvatura de Berry finita con signos opuestos en la vecindad de cada punto de Dirac, induciendo a su vez una corriente Hall de valle [58]. Por otro lado, existen sistemas de Dirac que por naturaleza presentan brechas de energía, lo cual es una ventaja sobre el grafeno al ser un sistema sin brecha. Por ejemplo, en algunos dicalcogenuros de metales de transición la simetría de inversión no se preserva, haciendo posible una respuesta Hall de valle al aplicar un campo eléctrico [59].

En un sistema de Dirac que no preserva la simetría de inversión espacial, cantidades iguales de carga se mueven en direcciones opuestas y perpendicular al campo eléctrico aplicado debido a la preservación de la simetría de inversión temporal, tal que la polarización transversal de carga neta permanece nula. Una de las formas de romper la simetría de inversión temporal es aplicando un campo magnético, el cual separa el espectro de energía en niveles de Landau y da lugar a un efecto Hall cuántico. El efecto Hall cuántico en grafeno ha sido observado en varios experimentos [60, 61, 62], evidenciando directamente la presencia de fermiones de Dirac sin masa en ese material. En ausencia de simetría de inversión espacial y sin un campo magnético externo, cada valle en el espectro de energía proporciona un escalón Hall cuántico con signos opuestos, tal que al sumar ambas contribuciones la respuesta transversal total se anula. Sin embargo, un flujo de campo magnético periódico local puede lidiar con este problema al romper la simetría de inversión temporal sin la necesidad de aplicar un campo magnético externo. Por ejemplo, Haldane demostró que la presencia de un flujo magnético local, con un flujo neto nulo en cada cel-

da unitaria, y un potencial periódico en la red hexagonal, en combinación con las energías de salto a primeros y segundos vecinos, da lugar a un *efecto Hall anómalo* de la forma $\sigma_{xy} = (\text{sgn}(m) - \text{sgn}(m'))e^2/2h = \pm e^2/h$, 0, cuando el nivel de Fermi se encuentra en la brecha de energía, donde $\text{sgn}(z)$ es la función signo, y m (m') es la masa de los portadores de carga en la vecindad del valle K (K'). Esto es, en el modelo de Haldane, el potencial periódico rompe la simetría de inversión espacial y el campo magnético local rompe la simetría de inversión temporal. Debido a que el flujo de campo magnético es nulo a través de la celda unitaria, las energías de salto a segundo vecinos adquieren un factor de fase que permite cambiar los signos de las masas de forma independiente.

El efecto Hall anómalo se puede lograr experimentalmente introduciendo impurezas magnéticas o colocando la red del sistema sobre sustratos ferromagnéticos, los cuales crean campos magnéticos locales. Un caso particular es utilizar átomos que lleven consigo un espín, resultando en una interacción entre los espines de los electrones en el sistema con los espines localizados de los átomos. Recientemente, Hill *et al.* propuso un modelo de textura de espín, donde una de las subredes de la red de grafeno es ocupada por espines localizados, creando un flujo de campo magnético periódico [63]. La posibilidad de que los espines se localicen en solo una de las subredes ya ha sido estudiada y observada experimentalmente para hidrógeno sobre grafeno [64]. Debido a que la textura de espín en el modelo de Hill actúa de manera efectiva como un flujo magnético, la simetría de inversión temporal se anula. Esto conduce a la posibilidad de variar las brechas de energía en ambos valles de manera independiente, observando que cuando ambos valles permanecen con brechas distintas y la energía de Fermi se encuentra en la brecha de energía, aparece una conductividad Hall universal a bajas frecuencias de la forma $\sigma_{xy} \propto \text{sgn}(m) - \text{sgn}(m')$,

donde $2m$ ($2m'$) es el tamaño de la brecha energética en el valle K (K'). Además, en el mismo trabajo se observó que la conductividad Hall óptica presenta una singularidad logarítmica bastante pronunciada cuando la frecuencia del campo externo se aproxima en magnitud al tamaño de la brecha energética en cada punto de Dirac, presentándose de esta forma la posibilidad de medir la brecha energética a partir de la conductividad Hall. Esto ofrece una forma alternativa a otros métodos de estudiar las propiedades electrónicas a partir de la respuesta óptica.

Otra de las propiedades ópticas capaces de dar información acerca de la naturaleza de la estructura de bandas son las rotaciones de la polarización, conocidas también como *efecto Kerr* y *efecto Faraday*, las cuales han sido ampliamente estudiadas en los últimos años para extraer las propiedades espectrales de sistemas de Dirac. El efecto Faraday corresponde a la rotación de la polarización para una onda electromagnética transmitida, el cual se manifiesta en ausencia de simetría de inversión temporal o simetría de inversión espacial. En cambio, la rotación de Kerr, la cual corresponde a la rotación de la polarización para una onda reflejada, únicamente se manifiesta ante un rompimiento de simetría de inversión temporal, haciéndola idónea para probar el efecto Hall cuántico a través de mediciones ópticas. Por ejemplo, mediciones de la rotación de Kerr han revelado la presencia del efecto Hall cuántico en una bicapa de grafeno en ausencia de simetría de inversión temporal [65], y se ha observado una cuantización en el efecto Kerr y Faraday en una capa de grafeno en el régimen de terahertz, asociado con el efecto Hall cuántico fraccionario [66].

Entre otros trabajos en los que se han estudiado las rotaciones de la polarización en sistemas de Dirac, se ha observado una rotación de Kerr de $\pi/2$ radianes en películas delgadas de aislante topológico en ausencia de simetría de inversión temporal [67], observándose también que el efecto Faraday queda determinado por la

constante de estructura fina. Por otro lado, el efecto Faraday se ha medido experimentalmente en grafeno en el régimen Hall cuántico, el cual ha mostrado ser de varios grados [68]. Estos fenómenos ópticos pueden ser ampliamente utilizados en dispositivos magneto-ópticos, además de que son ideales para distinguir el tipo de portador de carga y medir la movilidad en materiales de Dirac.

Capítulo 2

Sistemas de Dirac bidimensionales

2.1. Grafeno

Gracias a la naturaleza del carbono y a su capacidad para formar enlaces, este elemento exhibe una gran cantidad de alótipos, tales como fullerenos, nanotubos, grafito y grafeno, así como multicapas de este último, los cuales son acreedores de una amplia variedad de fenómenos físicos. Se puede decir que el grafeno es el componente básico para formar estos alótipos, por lo que el entendimiento de sus propiedades físicas es esencial para conocer las propiedades de las otras formas alotrópicas.

En su estado más bajo de energía, un átomo de carbono aislado posee una configuración electrónica $1s^2 2s^2 2p^2$. Esto es, el carbono es un elemento químico con seis electrones unidos al núcleo; dos electrones en el orbital $1s$, los cuales no están disponibles para formar enlaces, y cuatro electrones de valencia distribuidos en los orbitales $2s$ y $2p$, tal que solamente los dos electrones sin pareja en el orbital $2p$ participan normalmente en la formación de enlaces.

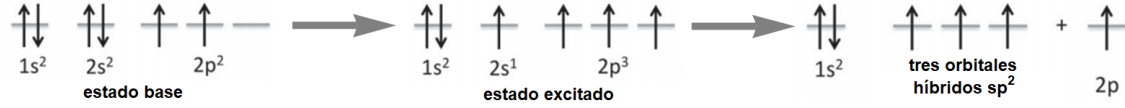


Figura 2.1: Configuración electrónica del carbono en el proceso de hibridación sp^2 . Un electrón en el orbital $2s$ en el estado base se reubica en un orbital $2p$, formándose un estado excitado. Finalmente el orbital $2s$ se hibrida con dos orbitales $2p$, lo cual resulta en tres orbitales híbridos sp^2 . Imágenes extraídas de Ref. [69]

Cabe señalar que el carbono puede incrementar el número de electrones vacantes para formar enlaces, ya que la formación de enlaces favorece una disminución en la energía del sistema aislado. Tal proceso de reordenamiento de electrones se le conoce como *hibridación*, y gracias a éste los átomos de carbono se pueden ordenar para formar una red periódica bidimensional de forma hexagonal, dando lugar al grafeno [69]. En este material, uno de los electrones en el estado $2s$ se reubica en un orbital $2p$ vacío, produciéndose un estado excitado. Eventualmente, el orbital $2s$ y dos orbitales $2p$ se hibridan para formar tres orbitales híbridos sp^2 , cada uno con un electrón, como se ilustra en la Fig. 2.1. Para minimizar la energía, los orbitales atómicos deben permanecer lo más alejados posibles, por lo que los tres orbitales sp^2 formarán un ángulo de 120 grados entre ellos en un plano, mientras que el orbital $2p$ restante permanece perpendicular a dicho plano. Los orbitales híbridos son los encargados de formar enlaces covalentes ocupados σ y desocupados σ^* , confiriéndole al grafeno su estabilidad y flexibilidad. Por otro lado, el orbital $2p$ interacciona con los orbitales $2p$ vecinos para formar orbitales π y π^* , los cuales producen bandas de conducción y de valencia, respectivamente (ver Fig. 2.2(a)). Dichos orbitales se encuentran en la vecindad del nivel de Fermi en grafeno prístino, por lo que son los que desempeñan el papel más importante en excitaciones a bajas energías (ver Fig. 2.2(b)).

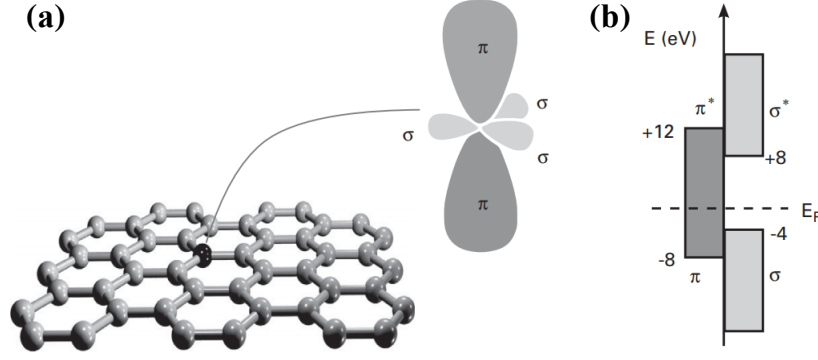


Figura 2.2: (a) Ilustración de la red del grafeno y sus orbitales electrónicos. Los orbitales σ forman enlaces covalentes fuertemente enlazados con los átomos de carbono vecinos, mientras que los orbitales π , perpendiculares a los orbitales σ , son responsables de la conducción de los portadores de carga. (b) Esquema que muestra cómo los orbitales π se encuentran en la proximidad del nivel de Fermi E_F , y como los orbitales σ y σ^* se encuentran separados por una brecha de energía de aproximadamente 12 eV, haciendo despreciable su contribución en las propiedades de transporte del grafeno. Imágenes extraídas de Ref. [69]

2.1.1. Red hexagonal y descripción de amarre fuerte

Para el estudio de las propiedades electrónicas del grafeno, primero es necesario construir matemáticamente la red hexagonal y determinar el hamiltoniano. Para ello, se divide la red en 2 subredes, denotadas como A y B, ya que la red hexagonal no forma una red de Bravais por sí misma, es decir, una red de puntos discretos accesibles mediante la combinación lineal de dos vectores base. Para construir una red de Bravais, es conveniente definir los siguientes vectores a primeros vecinos

$$\begin{aligned}\delta_1 &= \frac{1}{2}a_0(\sqrt{3}, -1), \\ \delta_2 &= -\frac{1}{2}a_0(\sqrt{3}, 1), \\ \delta_3 &= a_0(0, 1),\end{aligned}\tag{2.1.1}$$

(en la base $\{\hat{x}, \hat{y}\}$ del espacio real) donde a_0 (≈ 1.42 Å) es la distancia entre cada átomo de la red. Ahora, los vectores base se pueden construir en términos de los

vectores anteriores de la siguiente manera

$$\mathbf{a}_1 = \boldsymbol{\delta}_3 - \boldsymbol{\delta}_1, \quad (2.1.2)$$

$$\mathbf{a}_2 = \boldsymbol{\delta}_3 - \boldsymbol{\delta}_2. \quad (2.1.3)$$

Entonces, la celda unitaria de la red hexagonal queda formada por dos átomos (A y B), con los vectores base anteriores formando una red triangular de Bravias definida por $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2$, con $n_1, n_2 \in \mathbb{Z}$ (ver Fig. 2.3(a)). De igual forma, es posible construir la red recíproca especificando los vectores base recíprocos $\mathbf{b}_j$ que satisfagan $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$. Tales vectores tienen la siguiente forma

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi}{3a_0}(-\sqrt{3}, 1), \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi}{3a_0}(\sqrt{3}, 1), \end{aligned}$$

(en la base $\{\hat{k}_x, \hat{k}_y\}$ del espacio recíproco). En la Fig. 2.3(b) se muestran los vectores base recíprocos y la primera zona de Brillouin (en verde), o celda unitaria del espacio recíproco. La forma hexagonal de la primera zona de Brillouin da lugar a dos puntos no equivalentes en las esquinas, es decir, dos puntos que no pueden ser conectados por los vectores base recíprocos, los cuales se denotan como K y K' , y se pueden localizar mediante los vectores $\mathbf{K} = \frac{4\pi}{9a_0}(\sqrt{3}, 0)$ y $\mathbf{K}' = -\frac{4\pi}{9a_0}(\sqrt{3}, 0)$, respectivamente.

Como se mencionó anteriormente, los orbitales híbridos en cada átomo de carbono forman enlaces covalentes σ con átomos vecinos, los cuales están fuertemente enlazados. Además, los orbitales π se superponen con los orbitales π más cercanos, permitiendo a los portadores de carga transportarse a sus primeros vecinos [3]. Bajo estas consideraciones, es adecuado hacer uso de la aproximación de amarre fuerte (o

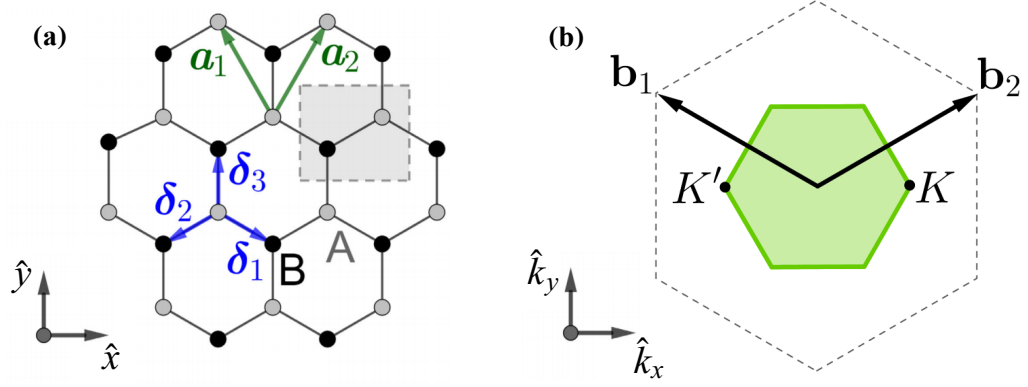


Figura 2.3: (a) Red de grafeno en donde se muestran los vectores base $\mathbf{a}_1$ y $\mathbf{a}_2$, además de los vectores a primeros vecinos δ_1 , δ_2 y δ_3 . El rectángulo gris representa la celda unitaria formada por los sitios A y B. (b) Vectores base recíprocos $\mathbf{b}_1$ y $\mathbf{b}_2$, donde la primera zona de Brillouin corresponde al hexágono verde. Los puntos K y K' denotan puntos de alta simetría.

tight-binding en inglés) para estudiar la estructura electrónica del grafeno. En segunda cuantización, el hamiltoniano de amarre fuerte para el grafeno tiene la siguiente forma

$$H_{tb} = -t_0 \sum_{\mathbf{r}} \sum_{l=1}^3 a_{\mathbf{r}}^{\dagger} b_{\mathbf{r}+\delta_l} + \text{H.c.}, \quad (2.1.4)$$

donde el operador $a_{\mathbf{r}}^{\dagger}$ crea un electrón en el sitio $\mathbf{r} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2$ en la subred A, y $b_{\mathbf{r}+\delta_l}$ aniquila un electrón en el sitio $\mathbf{r}+\delta_l$ en la subred B, t_0 (≈ 2.8 eV) es la energía de salto o integral de salto entre orbitales π vecinos, y H.c. es el hermitiano conjugado, esto para asegurar eigenvalores reales. Cabe señalar que es posible considerar interacciones a segundos vecinos, es decir, considerar que los electrones pueden transportarse entre sitios de una misma subred, ya que existe un pequeño traslape de los orbitales π entre dichos sitios. Tales interacciones no se están considerando en el hamiltoniano en Ec. (2.1.4). Ahora, escribiendo los operadores de creación y aniquilación en su

representación de Fourier, esto es,

$$c_{\mathbf{r}}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \quad (2.1.5)$$

$$c_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}}, \quad (2.1.6)$$

donde N es el número de sitios de la red y $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ el momento cristalino, es posible recuperar el siguiente hamiltoniano 2×2 de Bloch en el espacio recíproco

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon(\mathbf{k}) \\ \epsilon^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}, \quad \epsilon(\mathbf{k}) = -t_0 \sum_{l=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_l}. \quad (2.1.7)$$

Resolviendo la ecuación de eigenvalores $H(\mathbf{k})\Psi(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k})\Psi(\mathbf{k})$, se obtiene la relación de dispersión para los electrones en grafeno

$$\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) = \lambda |\epsilon(\mathbf{k})| = \lambda t_0 \sqrt{1 + 4 \cos^2(\sqrt{3} \tilde{k}_x) + 4 \cos(\sqrt{3} \tilde{k}_x) \cos(3 \tilde{k}_y)}, \quad (2.1.8)$$

donde $\lambda = \pm$ corresponde a la banda de conducción (orbital π^*) y banda de valencia (orbital π), respectivamente, y se ha definido $\tilde{k}_i = k_i a_0/2$ ($i = x, y$). Además, dado que el orbital $2p$ solamente está ocupado por un electrón, la banda de valencia está completamente ocupada, mientras que la banda de conducción está desocupada. Por lo tanto, suele considerarse una energía de Fermi igual a cero para grafeno en su estado base. La Fig. 2.4 muestra la estructura de bandas dentro de la primera zona de Brillouin. Resulta interesante preguntarse los valores de $\mathbf{k}$ para los cuales $\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k})$ es igual a cero. Tales valores caen justamente en las esquinas de la primera zona de Brillouin, es decir, sobre los puntos K y K' . En esos puntos se tocan la banda de conducción y la banda de valencia, cayendo justamente sobre el nivel de Fermi,

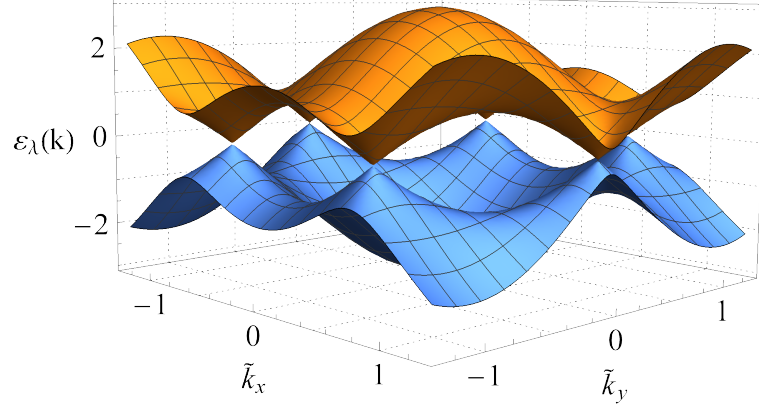


Figura 2.4: Espectro de energía $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$ (en unidades de t_0) del grafeno en su estado base, donde se ha definido $\tilde{k}_i = k_i a_0/2$ ($i = x, y$). Se muestra la banda de conducción $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ (anaranjado) y la banda de valencia $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ (azul) en la primera zona de Brillouin del espacio recíproco.

permitiéndole al grafeno ser un semimetal.

2.1.2. Fermiones de Dirac sin masa

La aproximación a bajas energías es frecuentemente utilizada en el estudio de las propiedades electrónicas, la cual consiste en encontrar una expresión de la relación de dispersión para $\mathbf{k}$ en la vecindad de los puntos K y K' . Para ello, resulta conveniente definir un vector $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{K}$ y expandir la Ec. (2.1.7) en series de Taylor a primer orden alrededor de $\mathbf{q} = 0$, esto es,

$$\epsilon(\mathbf{q}) \approx \epsilon(\mathbf{K}) + \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{q}) \big|_{\mathbf{k}=\mathbf{K}} = q_x - iq_y. \quad (2.1.9)$$

Haciendo un tratamiento similar alrededor del punto K' , se recupera el siguiente hamiltoniano efectivo a bajas energías

$$H^\xi(\mathbf{p}) = v_F \hbar \begin{pmatrix} 0 & \xi q_x - i q_y \\ \xi q_x + i q_y & 0 \end{pmatrix} = v_F \boldsymbol{\sigma}^\xi \cdot \mathbf{p}, \quad (2.1.10)$$

donde $v_F = 3t_0 a_0 / 2\hbar$ es la velocidad de Fermi, con un valor aproximado a 10^6 m/s [3], $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{q}$ es el momento de los electrones relativo a los puntos K y K' , y $\boldsymbol{\sigma}^\xi = (\xi \sigma_x, \sigma_y)$, con σ_i las matrices de Pauli,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.1.11)$$

Además, $\xi = \pm$ denota el índice de valle, correspondiente a los puntos K y K' , respectivamente. Por simplicidad, suele tomarse el vector de onda $\mathbf{k}$ como el vector de onda relativo a los puntos de alta simetría. Resolviendo la ecuación de eigenvalores $H^\xi \psi(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) \psi(\mathbf{k})$ se recupera la siguiente relación de dispersión a bajas energías

$$\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) = \lambda v_F \hbar k, \quad (2.1.12)$$

y las siguientes funciones de onda

$$\psi_\lambda^\xi(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\xi\theta/2} \\ \lambda e^{i\xi\theta/2} \end{pmatrix}, \quad (2.1.13)$$

donde $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ y $\theta = \tan^{-1}(k_y/k_x)$ es el ángulo azimutal en el espacio de momentos. El hecho de que las funciones de onda tengan dos componentes se debe a que la celda unitaria de la red hexagonal está formada por dos átomos o sitios, lla-

mados A y B anteriormente. Esto es, el módulo cuadrado de la componente superior (inferior) contiene la amplitud de la función de onda en el sitio A (B). Por otro lado, es importante destacar que aunque se están considerando ambos valles por separado (ya que éstos se encuentran separados por un momento muy grande y su tratamiento por separado es completamente válido), el hamiltoniano completo a bajas energías para grafeno puede escribirse de la siguiente manera

$$H(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} v_F \boldsymbol{\sigma}^+ \cdot \mathbf{p} & 0 \\ 0 & v_F \boldsymbol{\sigma}^- \cdot \mathbf{p} \end{pmatrix}. \quad (2.1.14)$$

Es posible hacer una comparación del hamiltoniano anterior con el hamiltoniano de una partícula relativista sin masa cuya dinámica es descrita por la ecuación de Dirac (ver Apéndice A). Ese hamiltoniano tiene la forma

$$H_D(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} -c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & 0 \\ 0 & c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \end{pmatrix}, \quad (2.1.15)$$

donde c es la velocidad de la luz. Evidentemente, el hamiltoniano que describe a los portadores de carga en grafeno a bajas energías en Ec. (2.1.14) es bastante similar al hamiltoniano anterior con la velocidad de la luz reemplazada por la velocidad de Fermi, cuya relación de dispersión en Ec. (2.1.12) es lineal en el momento. Consecuentemente, las partículas efectivas (o cuasipartículas) en grafeno a excitaciones en la vecindad de los puntos K y K' (nombrados ahora puntos de Dirac) se comportan como fermiones de Dirac sin masa, concediéndole al grafeno una amplia variedad de propiedades físicas validadas experimentalmente nunca antes vistas en otro material [70]. Además, haciendo la correspondiente analogía con mecánica cuántica relativista, el índice de banda λ denota el tipo de partícula, tal que un portador de carga en

la banda de conducción ($\lambda = +$) se comporta como partícula, y uno en la banda de valencia ($\lambda = -$) se comporta como antipartícula con carga opuesta, comúnmente conocida como hueco en física de la materia condensada.

Otra analogía importante con la ecuación de Dirac sin masa es la naturaleza espinorial de las funciones de onda en Ec. (2.1.13), ya que al tomar una rotación de 2π se recupera la función de onda original pero con signo opuesto, esto es, $\psi_\lambda^\xi(k, \theta + 2\pi) = -\psi_\lambda^\xi(k, \theta)$, lo cual es una característica del espinor que describe una partícula con espín $1/2$. Entonces, el grado de libertad de subred (A y B) actúa como espín, y se le conoce comúnmente como *pseudoespín*, tal que el pseudoespín en el espacio de momentos se comporta similarmente al espín en el espacio real.

2.2. Grafeno con distorsión Kekulé

Las propiedades electrónicas del grafeno tienen la particularidad de ser altamente sensibles a la presencia de átomos absorbidos en su superficie, lo cual lo hace susceptible a la formación de fases espaciales, tal como la distorsión Kekulé [71]. Este tipo de distorsión consiste en una distribución periódica de enlaces fuertes y débiles, por lo que se puede describir como una onda de densidad de enlace entre átomos vecinos de carbono. En grafeno, la distorsión Kekulé fue observada experimentalmente por primera vez por Gutiérrez *et al.* después de que una capa de grafeno se crece epitaxialmente sobre sustrato de cobre [16]. La distorsión Kekulé se da como consecuencia de la interacción entre grafeno y vacancias en el sustrato de cobre (ver Fig. 2.5). Además, la distribución periódica de enlaces fuertes y débiles da lugar a una súper-celda unitaria hexagonal tres veces mayor a la del grafeno prístino, influyendo directamente sobre sus propiedades electrónicas.

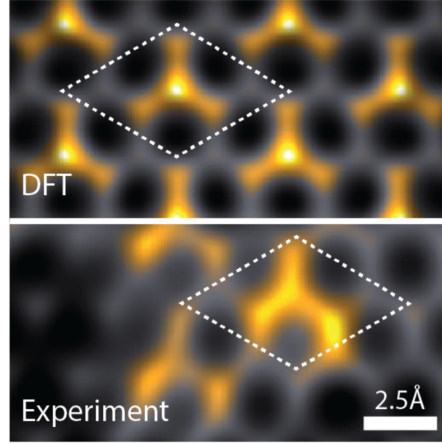


Figura 2.5: Comparación entre simulación y experimento de grafeno depositado sobre sustrato de cobre. Arriba: Cálculos de primeros principios de una vacancia de cobre debajo de una capa de grafeno. Abajo: Imagen experimental lograda con un microscopio de tunelamiento (STM). Imágenes extraídas de Ref. [14].

Las deformaciones locales que surgen como resultado de la interacción entre las vacancias de cobre y los átomos de carbono en la capa de grafeno dan lugar a una distribución periódica de enlaces en forma Y's en la red hexagonal, por lo que a esta fase se le conoce comúnmente como distorsión Kek-Y, tal como se ilustra en la Fig. 2.6(a). Además, resultados teóricos y experimentales han revelado otro tipo de fase espacial de Kekulé, conocida como distorsión Kek-O. En este tipo de distorsión, la periodicidad de enlaces con distinta fuerza se distribuyen en la red hexagonal en forma de O's (ver Fig. 2.6(b)). La distorsión Kek-O se encuentra en una estructura de benceno, la cual también ha sido estudiada en grafeno [17, 72]. Más recientemente, se ha observado que al colocar una capa de grafeno sobre dióxido de silicio, las dos fases de Kekulé (Kek-Y y Kek-O) aparecen como resultado de las deformaciones locales en la red de grafeno [19], y en grafeno intercalado con litio la fase espacial Kek-O también se manifiesta [18].

Como se mencionó anteriormente, las esquinas de la primera zona de Brillouin de la red recíproca de grafeno forman dos conjuntos de puntos inequivalentes, denotados

como K y K' . Tales puntos se encuentran separados por un momento muy grande, y es posible describirlos como un grado de libertad similar al espín, conocido ahora como *isoespín*, o grado de libertad de valle, el cual es un número cuántico de espín adicional al momento magnético de espín y al pseudoespín que se genera por el grado de libertad de subred. Además, aunque el acoplamiento entre el espín magnético y el momento de los portadores de carga es muy débil, el acoplamiento entre el espín y el pseudoespín es muy fuerte, tal que dicho grado de libertad es paralelo o antiparalelo a la dirección de movimiento, teniendo un bloqueo pseudoespín-momento dado por el operador de helicidad (ver Sección 2.4). Gamayun *et al.* demostró que en grafeno con distorsión Kek-Y el grado de libertad de isoespín y el momento se acoplan, de manera similar como se acopla el momento al pseudoespín en grafeno prístino, por lo que esta fase exhibe un bloqueo de isoespín-momento [17].

En grafeno con distorsión Kekulé, la energía de salto se puede describir matemáticamente como una onda de densidad de enlace de la siguiente forma

$$t_{\mathbf{r},l}/t_0 = 1 + 2 \operatorname{Re}\{\tilde{\Delta} e^{i(p\mathbf{K}+q\mathbf{K}')\cdot\boldsymbol{\delta}_l+i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}-i2\pi(p+q)/3}\}, \quad (2.2.1)$$

la cual modifica periódicamente la energía de salto entre un átomo en el sitio $\mathbf{r}$ y sus primeros vecinos en $\mathbf{r} + \boldsymbol{\delta}_l$, donde $\mathbf{G} = \mathbf{K} - \mathbf{K}'$ es el vector de onda de Kekulé, el cual acopla a ambos valles en el espacio de momentos, y $\tilde{\Delta} = e^{i2\pi(p+q+m)/3}\Delta_0$ es la amplitud de acoplamiento (el cual puede ser real o imaginario), o también conocido como parámetro de Kekulé, con $p, q \in \mathbb{Z}_3$ y $m \in \mathbb{Z}$. Adicionalmente, se introduce el índice ν definido como

$$\nu = 1 + q - p \bmod 3, \quad (2.2.2)$$

el cual es utilizado para describir los dos tipos de distorsión diferentes, la textura

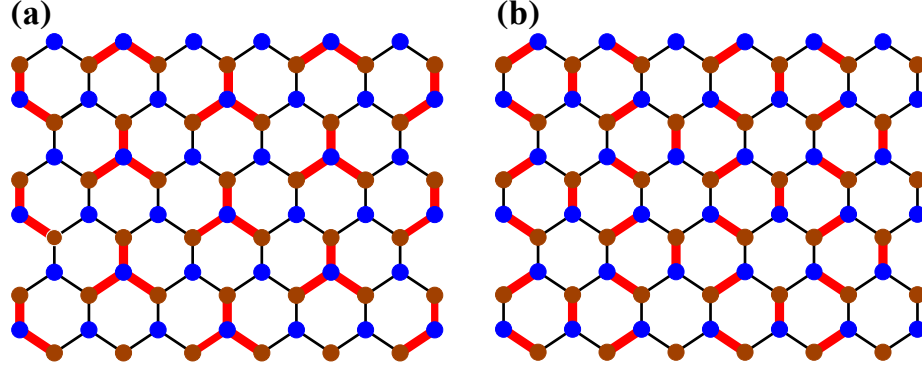


Figura 2.6: Red hexagonal de grafeno con distorsión Kekulé, donde la distribución periódica de enlaces fuertes y débiles se representa con color rojo y negro. (a) Grafeno con distorsión Kek-Y, considerando $\nu = 1$. (b) Grafeno con distorsión Kek-O ($\nu = 0$).

Kek-Y ($\nu = \pm 1$) y la textura Kek-O ($\nu = 0$). Dado lo anterior, el hamiltoniano de grafeno con distorsión Kekulé en la descripción de amarre fuerte toma la siguiente forma

$$H_{tb} = - \sum_{\mathbf{r}} \sum_{l=1}^3 t_{\mathbf{r},l} a_{\mathbf{r}}^{\dagger} b_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}_l} + \text{H.c.} \quad (2.2.3)$$

Al considerar $t_{\mathbf{r},l} = t_0$, el hamiltoniano anterior recupera la forma del hamiltoniano en amarre fuerte de grafeno prístino en Ec. (2.1.4).

2.2.1. Hamiltoniano a bajas energías

Para el estudio de excitaciones a bajas energías en grafeno con distorsión Kekulé, se procede de manera similar al tratamiento utilizado para grafeno prístino en la Sección 2.1. Escribiendo los operadores de creación y aniquilación en Ec. (2.2.3) en su representación de Fourier y haciendo un tratamiento algebraico, se recupera el siguiente hamiltoniano 4×4 a bajas energías en el espacio de momentos

$$H(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & \tilde{\Delta} Q_{\nu} \\ \tilde{\Delta}^* Q_{\nu}^{\dagger} & v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \end{pmatrix}, \quad (2.2.4)$$

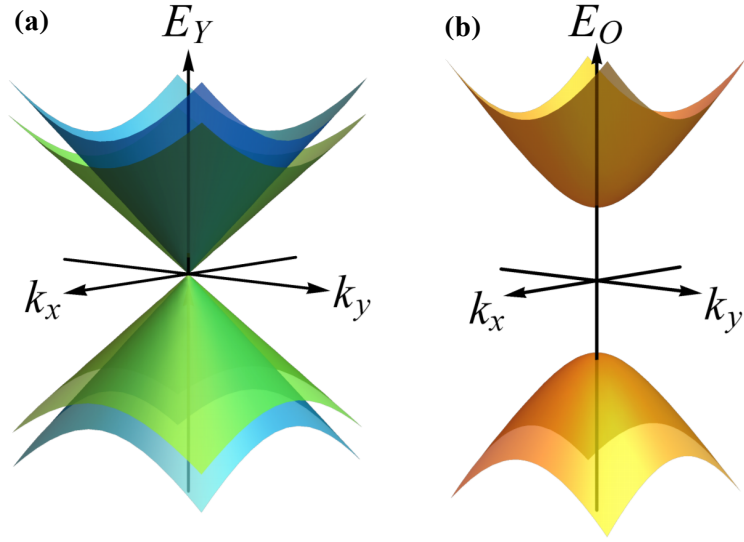


Figura 2.7: Espectro de energía de grafeno con distorsión Kekulé. (a) Estructura de bandas de grafeno con distorsión Kek-Y, donde los conos de Dirac se reubican en el centro de la zona de Brillouin con velocidades distintas. (b) Espectro energético degenerado de grafeno con distorsión Kek-O. Éste se caracteriza por tener una brecha de energía entre la banda de conducción y de valencia.

donde $\mathbf{p} = \hbar(k_x, k_y)$ es el momento de los portadores de carga, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ es el vector de Pauli, con σ_i las matrices de Pauli actuando sobre el grado de libertad de pseudoespín, y el operador Q_ν que mezcla los valles está dado por

$$Q_\nu = \begin{cases} 3t_0\sigma_z & \text{si } \nu = 0, \\ v_F(\nu p_x - ip_y)\sigma_0 & \text{si } \nu = \pm 1. \end{cases} \quad (2.2.5)$$

La estructura electrónica de bandas se recupera al resolver el problema de eigenvalores $H(\mathbf{k})\psi(\mathbf{k}) = E\psi(\mathbf{k})$, donde en este caso $\psi(\mathbf{k})$ es un espinor de cuatro componentes, el cual contiene las amplitudes de onda en las subredes A y B para los valles K y K' . Entonces, se encuentra que el espectro de energía de grafeno con distorsión

Kek-Y consiste en dos conos de Dirac concéntricos con distintas velocidades,

$$E_Y^{\xi,\eta}(k) = \eta v_F \hbar k (1 + \xi \Delta_0), \quad (2.2.6)$$

(ver Fig. 2.7(a)), con los espinores correspondientes dados por

$$\psi_{\xi,\eta}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \xi e^{-i2\theta} \\ \xi \eta e^{-i\theta} \\ \eta e^{-i\theta} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.2.7)$$

Para grafeno con distorsión Kek-O, el espectro de energía consiste en dos conos degenerados con brecha de energía,

$$E_O^\eta(k) = \eta \sqrt{(v_F \hbar k)^2 + (3t_0 \Delta_0)^2}, \quad (2.2.8)$$

(ver Fig. 2.7(b)), con espinores de la forma

$$\psi_\eta(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2(1 + \Delta_0^2)}} \begin{pmatrix} -e^{-i\theta} \\ -\eta \sqrt{1 + \Delta_0^2} \\ 0 \\ \Delta_0 \end{pmatrix}, \quad \psi'_\eta(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2(1 + \Delta_0^2)}} \begin{pmatrix} \eta \sqrt{1 + \Delta_0^2} \\ e^{i\theta} \\ \Delta_0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.2.9)$$

Aquí, el índice $\eta = \pm$ denota la banda de conducción y de valencia, respectivamente, y el índice $\xi = \pm$ corresponde al cono interno y externo en el espectro energético de grafeno Kek-Y, respectivamente. Los dos conos de Dirac concéntricos en grafeno con distorsión Kek-Y están caracterizados por dos velocidades diferentes, $v_F(1 + \Delta_0)$ para el cono interno o “rápido”, y $v_F(1 - \Delta_0)$ para el cono externo o “lento”.

2.3. Sistemas bidimensionales con conos de Dirac inclinados y anisotrópicos

Recientemente, las estructuras bidimensionales de boro han sido ampliamente estudiadas debido a su potencial aplicación en la fabricación de dispositivos electrónicos, y a que se ha logrado la sintetización de tres estructuras cristalinas bidimensionales de este elemento, conocidas como borofenos, dando así lugar a una nueva familia de materiales capaces de ser explotados en el área de la nanoelectrónica [73, 74]. Además, en experimentos recientes se ha mostrado la sintetización de borofeno hidrogenado en el vacío, del cual es posible extraer una modificación química ordenada de borofeno expulsando térmicamente el hidrógeno [75]. Por otro lado, una de las estructuras de boro que ha mostrado una gran estabilidad a través de cálculos de primeros principios es el llamado borofeno ortorrómbico $8-Pmmn$ [26, 27]. La estructura cristalina de este material se ilustra en la Fig. 2.8. Este material bidimensional posee propiedades electrónicas similares a las del grafeno, es decir, en él los portadores de carga también se comportan como fermiones de Dirac sin masa. La estructura de bandas consiste en dos conos de Dirac, pero a diferencia del grafeno, éstos son anisotrópicos y presentan cierta inclinación, esto es, la velocidad de los portadores de carga depende del ángulo azimutal en el espacio de momentos, y las bandas de conducción y de valencia no son simétricas con respecto al nivel de Fermi.

Por otro lado, estudios teóricos y experimentales de transporte electrónico en el semiconductor orgánico $\alpha-(\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$ han revelado que es posible describir las excitaciones de bajas energías como un sistema de Dirac bidimensional sin masa, que al igual que el borofeno presenta un espectro de Dirac con dos conos anisotrópicos e inclinados [29, 30, 31]. Este semiconductor es un cristal con cuatro moléculas

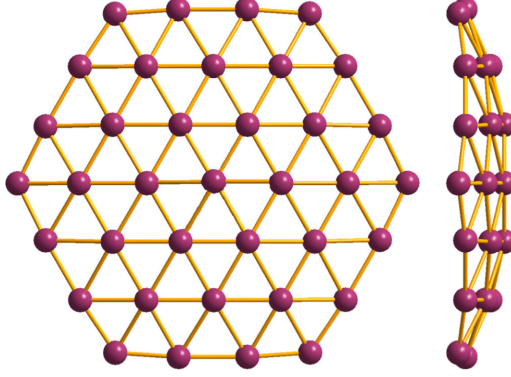


Figura 2.8: Representación de la red del borofeno ortorrómbico 8- $Pmmn$, donde cada nodo corresponde a un átomo de boro. Imágen extraída de Ref. [48].

diferentes formando una celda unitaria, en donde el punto de Dirac se presenta en un punto degenerado accidental en la zona de Brillouin. Otros sistemas que de igual forma presentan una estructura de bandas con conos inclinados y anisotrópicos son: el grafeno con distorsión tipo quinoide, el cual se recupera cuando los puntos de Dirac se mueven lejos de las esquinas de la zona de Brillouin por deformaciones externas [28], y el grafeno parcialmente hidrogenado C_6H_2 , en donde se ha encontrado que la relación de dispersión es altamente anisotrópica [34]. Además, cálculos de primeros principios y observaciones experimentales han revelado que monocapas de dicalcogenuros de metales de transición con estructura $1T'$ presentan a bajas energías bandas de Dirac inclinadas y anisotrópicas con brechas energéticas en los puntos K , K' [32, 33].

Los sistemas mencionados anteriormente comparten una estructura de bandas similar, consistiendo en dos conos de Dirac anisotrópicos e inclinados. Las excitaciones a bajas energías de esta clase de sistemas son descritas por un hamiltoniano de Dirac de la siguiente forma

$$H^\xi(\mathbf{k}) = \xi(\hbar v_t k_y \mathbb{I} + \hbar v_x k_x \sigma_x + \xi \hbar v_y k_y \sigma_y), \quad (2.3.1)$$

donde $\mathbb{I}$ es la matriz identidad, y nuevamente las matrices de Pauli σ_i actúan sobre el grado de libertad de sitio. La anisotropía en el espectro de energía surge cuando $v_x \neq v_y$. La inclinación de los conos de Dirac se genera debido al término proporcional a $\mathbb{I}$ en el hamiltoniano, donde la velocidad v_t es una medida de dicha inclinación. Además, se observa que el hamiltoniano que describe al grafeno se recupera al tomar $v_x = v_y = v_F$ y $v_t = 0$. Para el caso particular de borofeno 8- $Pmmn$, cálculos de primeros principios han revelado que las velocidades están dadas por $v_x = 0.86 v_F$ y $v_y = 0.69 v_F$, con la velocidad de inclinación $v_t = 0.32 v_F$ [27]. La relación de dispersión correspondiente al hamiltoniano en Ec. (2.3.1) está dado por

$$\varepsilon_\lambda^\xi(k_x, k_y) = \xi \alpha_t k_y + \lambda \sqrt{\alpha_x^2 k_x^2 + \alpha_y^2 k_y^2}, \quad (2.3.2)$$

donde se ha definido $\alpha_i = \hbar v_i$ ($i = x, y, t, F$), y $\lambda = \pm$ denota la banda de conducción y de valencia, respectivamente. A una energía de Fermi fija ε_F , los contornos de Fermi se definen como $C_\lambda^\xi = \{\mathbf{k} | \varepsilon_\lambda^\xi(\mathbf{k}) = \varepsilon_F\}$. De acuerdo al espectro de energía en Ec. (2.3.2), estos contornos son elipses definidas por la siguiente ecuación

$$(1 - \gamma^2) \alpha_x^2 (k_{\lambda,x}^\xi)^2 + (1 - \gamma^2)^2 \alpha_y^2 \left(k_{\lambda,y}^\xi + \xi \lambda \frac{\gamma}{1 - \gamma^2} \frac{|\varepsilon_F|}{\alpha_y} \right)^2 = \varepsilon_F^2, \quad (2.3.3)$$

donde se ha definido el parámetro adimensional de inclinación $\gamma = v_t/v_y$ ($0 \leq \gamma < 1$). El origen de la elipse se debe a la anisotropía en el espectro ($v_x \neq v_y$), a diferencia del contorno de Fermi circular correspondiente al grafeno. Además, la elipse se encuentra desplazada del origen, y centrada en $(0, -\xi \lambda \gamma |\varepsilon_F| / (1 - \gamma^2) \alpha_y)$, como consecuencia de la inclinación de las bandas de energía (v_t). Finalmente, los espinores que describen

a los fermiones de Dirac sin masa en esta clase de sistemas están dados por

$$\psi_{\lambda}^{\xi}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\xi\phi_{\mathbf{k}}/2} \\ \lambda e^{i\xi\phi_{\mathbf{k}}/2} \end{pmatrix}, \quad (2.3.4)$$

donde $\phi_{\mathbf{k}} = \tan^{-1}(\alpha_y k_y / \alpha_x k_x)$, tal que nuevamente el grado de libertad de pseudo-espín se ve reflejado en el espinor.

2.4. Simetrías en sistemas de Dirac

Las simetrías presentes en los sistemas de Dirac bidimensionales hasta ahora discutidos desempeñan un papel crucial en sus propiedades físicas tan exóticas, las cuales a la vez garantizan la existencia de fermiones de Dirac sin masa, manteniendo los nodos de Dirac. La preservación de simetrías dan lugar a la universalidad de un gran número de funciones respuesta y susceptibilidades en esta clase de sistemas [8].

Helicidad

Los sistemas de Dirac se pueden clasificar a través de las operaciones de simetría que preserva su hamiltoniano. Una de las simetrías más importantes en estos sistemas es la *helicidad*, representada por el operador de helicidad Λ . Este operador se define como la proyección del momento a lo largo de la dirección del pseudoespín. Por ejemplo, el operador de helicidad correspondiente a las cuasipartículas en grafeno descritas por el hamiltoniano a bajas energías en Ec. (2.1.10) está dado por [3]

$$\Lambda^{\xi} = \boldsymbol{\sigma}^{\xi} \cdot \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|}. \quad (2.4.1)$$

Evidentemente, el operador anterior conmuta con el hamiltoniano en Ec. (2.1.10), de manera que se dice que la helicidad es una cantidad conservada, y las eigenfunciones $\psi_\lambda^\xi(\mathbf{k})$ en Ec. (2.1.13) del hamiltoniano también son eigenfunciones de Λ^ξ , esto es,

$$\Lambda^\xi \psi_\lambda^\xi(\mathbf{k}) = \lambda_\xi \psi_\lambda^\xi(\mathbf{k}). \quad (2.4.2)$$

De la ecuación de eigenvalor anterior es posible deducir algunas conclusiones acerca de la helicidad de los fermiones de Dirac en grafeno. Para excitaciones en la vecindad del punto K ($\xi = +$), la helicidad es positiva para cuasipartículas en la banda de conducción ($\lambda = +$), esto es, el momento y el pseudoespín son paralelos. En cambio, para la banda de valencia ($\lambda = -$), la helicidad es negativa, de modo que el momento y el pseudoespín son antiparalelos. Por otro lado, para excitaciones en la vecindad del punto K' ($\xi = -$), la helicidad se invierte, tal que la helicidad es negativa (positiva) para estados en la banda de conducción (valencia).

Además, es posible escribir otra expresión para el operador de helicidad concerniente a los portadores de carga en sistemas de Dirac inclinados y anisotrópicos, descritos por el hamiltoniano a bajas energías en Ec. (2.3.1). Tal operador está definido como sigue [38]

$$\Lambda^\xi = \frac{\xi \alpha_x k_x \sigma_x + \alpha_y k_y \sigma_y}{\sqrt{\alpha_x^2 k_x^2 + \alpha_y^2 k_y^2}}. \quad (2.4.3)$$

Al igual que en el caso de grafeno, las eigenfunciones del hamiltoniano que describe esta clase de sistemas de Dirac (ver Ec. (2.3.4)), son también eigenfunciones del operador de helicidad anterior, y nuevamente la helicidad se invierte al pasar del valle K al K' .

La conservación de la helicidad en sistemas de Dirac bidimensionales es responsable de algunas de sus propiedades más exóticas. Tal es el caso de la ausencia de

retrodispersión, en la que existe una imposibilidad de inversión en la dirección del momento ($\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$), debido a que se requiere una inversión simultánea en la dirección del pseudoespín. El momento y el pseudoespín se encuentran fuertemente acoplados por helicidad, tal que la retrodispersión no es posible en esta clase de sistemas, a menos que la presencia de un potencial en el hamiltoniano sea capaz de invertir la dirección del pseudoespín. Consecuentemente, las quasipartículas en sistemas de Dirac pueden “tunear” a través de barreras de potencial relativamente altas, dando lugar a la paradoja de Klein [76].

Simetría electrón-hueco

Otra de las simetrías importantes en un sistema de Dirac es la simetría electrón-hueco. Se dice que un sistema preserva esta simetría si su hamiltoniano satisface [69]

$$\sigma_z H^\xi(\mathbf{k}) \sigma_z = -H^\xi(\mathbf{k}). \quad (2.4.4)$$

Se puede ver que el hamiltoniano de grafeno a bajas energías en Ec. (2.1.10) preserva la simetría electrón-hueco, lo que significa que el espectro de energía es simétrico con respecto a $\varepsilon(\mathbf{k}) = 0$. Sin embargo, esta simetría deja de preservarse al considerar interacciones a segundos vecinos en el hamiltoniano de amarre fuerte [3]. Por otro lado, en sistemas de Dirac con un espectro anisotrópico e inclinado descritos por el hamiltoniano en Ec. (2.3.1), la simetría electrón-hueco no se preserva, esto es, $\sigma_z H^\xi(\mathbf{k}) \sigma_z \neq -H^\xi(\mathbf{k})$, debido al término proporcional a v_t en el hamiltoniano, el cual da lugar a la inclinación de las bandas de energía. Este rompimiento de simetría se manifiesta en las propiedades físicas del sistema, por ejemplo, en su respuesta óptica [38].

Simetrías de inversión espacial e inversión temporal

Entre las simetrías más importantes en un sistema de Dirac se encuentran la simetría de inversión espacial y la simetría de inversión temporal, las cuales garantizan la presencia de fermiones de Dirac sin masa. Se dice que un sistema de Dirac preserva la simetría de inversión espacial si su hamiltoniano satisface [77]

$$\sigma_x H^+(-\mathbf{k}) \sigma_x = H^-(\mathbf{k}). \quad (2.4.5)$$

Esta simetría hace referencia a la simetría al intercambiar los sitios de las subredes A y B (ver Sección 2.1). Así, al preservarse esta operación, la probabilidad de ocupación de las cuasipartículas es la misma para ambas subredes. Note que aún si el hamiltoniano contiene un “término de masa” dependiente del valle del tipo $\Delta^\xi \sigma_z$ (mismo que se refleja como una brecha de energía en el punto de Dirac de magnitud $2|\Delta^\xi|$), la simetría de inversión espacial continúa preservándose siempre y cuando $\Delta^+ = -\Delta^-$. Si no se cumple esta condición, la simetría de inversión espacial deja de preservarse, por lo que es posible romper dicha simetría al abrir brechas de energía en el espectro, las cuales pueden ser inducidas por la presencia de impurezas que afecten preferentemente a una subred sobre la otra, tal como el dopaje por nitrógeno [78], o por la interacción con sustratos de SiC [79] o de hBN [80]. Esto es altamente deseable para inducir transiciones metal-aislante y tener mayor control sobre las propiedades electrónicas.

Por otro lado, se dice que un sistema de Dirac preserva la simetría de inversión temporal si su hamiltoniano cumple [77]

$$[H^-(-\mathbf{k})]^* = H^+(\mathbf{k}). \quad (2.4.6)$$

En un sistema de Dirac, se dice que las funciones de onda en los puntos K y K' están relacionadas por simetría de inversión temporal, ya que esta simetría es equivalente a una reflexión sobre el eje horizontal en el espacio de momentos, y al sustituir $k_x \rightarrow -k_x$ en la función de onda en la vecindad del punto K , se recupera la función de onda en la vecindad del punto K' (ver por ejemplo la Ec. (2.1.13)). Así, introducir un término en el hamiltoniano del tipo $\Delta^\xi \sigma_z$, preserva la simetría de inversión temporal siempre y cuando $\Delta^+ = \Delta^-$. La ruptura de esta simetría se puede realizar al aplicar un campo magnético al sistema. Éste separa el espectro de energía en niveles de Landau y da lugar al efecto Hall cuántico [60]. Sin embargo, también es posible romper la simetría de inversión temporal sin introducir un campo magnético externo. Por ejemplo, se pueden inducir campos magnéticos locales, ya sea por sustratos o impurezas magnéticas, dando lugar a un efecto Hall cuántico anómalo [81].

Si un sistema preserva simultáneamente la simetría de inversión espacial y la simetría de inversión temporal, su hamiltoniano satisface

$$\sigma_x [H^\xi(\mathbf{k})]^* \sigma_x = H^\xi(\mathbf{k}). \quad (2.4.7)$$

Esto es, el hamiltoniano no puede contener términos del tipo $\Delta^\xi \sigma_z$, ya que la preservación simultánea de ambas simetrías se logra cuando $\Delta^\pm = -\Delta^\pm$, dando lugar a $\Delta^\pm = 0$. Los nodos de Dirac están protegidos por ambas simetrías, tal que si alguna de ellas se viola aparece una brecha de energía en el punto de Dirac.

Capítulo 3

Conductividad óptica

3.1. Teoría de respuesta lineal y formalismo de Kubo

Al perturbar externamente un sistema cuántico en su estado de equilibrio, éste responderá modificando sus niveles de energía y sus ocupaciones. Esto se puede caracterizar a través de su función respuesta, que determina la relación entre la perturbación externa y la respuesta del sistema. Cuando la magnitud de la perturbación es lo suficientemente pequeña, una buena aproximación es considerar que la respuesta es proporcional (lineal) a la perturbación. Bajo estas circunstancias, la función respuesta del sistema queda determinada completamente por una constante de proporcionalidad, que a su vez depende de las propiedades de equilibrio [82].

A continuación se deriva la función respuesta de un sistema cuántico a un campo electromagnético dependiente del tiempo (o AC). Sin embargo, dentro de la teoría de respuesta lineal, es posible estudiar la respuesta de un sistema a una amplia

variedad de perturbaciones externas, ya que un sistema físico tiende a responder de forma distinta a cada perturbación. Entre estas funciones respuesta se encuentran la susceptibilidad de carga y de espín debida a la presencia de campos eléctricos y magnéticos externos, conductancia y función dieléctrica, por mencionar algunas. Además, también es posible estudiar la respuesta a vibraciones externas o fuerzas mecánicas utilizando esta teoría.

Para comenzar con el tratamiento de la teoría de respuesta lineal, se considera un sistema cuántico en equilibrio a temperatura fija T descrito por un hamiltoniano independiente del tiempo H_0 con eigenvalores $\{E_n\}$ y eigenestados $\{|n\rangle\}$. Se desea conocer cuál es el valor esperado de una cantidad observable descrita por un operador A después de que el sistema es retirado del equilibrio por una perturbación externa dependiente del tiempo $V(t)$, esto es, se desea conocer $\langle A \rangle$ a orden lineal en $V(t)$.

Antes de introducir la perturbación, el valor esperado de A se evalúa a través de la matriz de densidad ρ_0 de la siguiente manera

$$\langle A \rangle = \text{Tr}\{\rho_0 A\} = \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-E_n/k_B T} \langle n|A|n\rangle, \quad (3.1.1)$$

con la matriz de densidad dada por

$$\rho_0 = \frac{1}{Z_0} e^{-H_0/k_B T} = \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-E_n/k_B T} |n\rangle\langle n|, \quad (3.1.2)$$

donde $Z_0 = \sum_n e^{-E_n/k_B T}$ es la función de partición y k_B la constante de Boltzmann. La matriz de densidad es utilizada para describir un sistema cuántico lo suficientemente grande, tal que no es posible describirlo con un solo vector de estado, sino con un conjunto completo de éstos con su correspondiente conjunto de probabilidades, las cuales determinan la contribución de cada estado (o sub-estado) al sistema

completo. En el límite clásico, dichas probabilidades vienen dadas por la función de Maxwell-Boltzmann

$$w_n = \frac{1}{Z_0} e^{-E_n/k_B T}, \quad (3.1.3)$$

la cual determina la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado con energía E_n .

Ahora, a un tiempo $t = t_0$, se aplica la perturbación externa $V(t)$, tal que el hamiltoniano del sistema fuera de equilibrio toma la siguiente forma

$$H(t) = H_0 + V(t) \Theta(t - t_0), \quad (3.1.4)$$

donde $\Theta(z)$ es la función escalón unitaria. Para encontrar el valor esperado de A a un tiempo $t > t_0$ es necesario estudiar la evolución temporal de los eigenestados del sistema sin perturbar. Para ello, se utiliza la representación de interacción, lo cual resulta conveniente cuando el hamiltoniano del sistema perturbado se puede escribir en términos del hamiltoniano del sistema sin perturbar y la perturbación externa, tal como en Ec. (3.1.4). En esta representación, la evolución de los estados cuánticos se define de la siguiente manera

$$|\hat{n}(t)\rangle \equiv e^{iH_0 t/\hbar} |n(t)\rangle, \quad (3.1.5)$$

donde la dinámica de $|n(t)\rangle$ es gobernada por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |n(t)\rangle = H(t) |n(t)\rangle. \quad (3.1.6)$$

Calculando la derivada temporal de $|\hat{n}(t)\rangle$ se recupera

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} |\hat{n}(t)\rangle &= \frac{\partial}{\partial t} (e^{iH_0 t/\hbar} |n(t)\rangle) \\
&= e^{iH_0 t/\hbar} \frac{\partial}{\partial t} |n(t)\rangle + \frac{i}{\hbar} e^{iH_0 t/\hbar} H_0 |n(t)\rangle \\
&= -\frac{i}{\hbar} e^{iH_0 t/\hbar} H(t) |n(t)\rangle + \frac{i}{\hbar} e^{iH_0 t/\hbar} H_0 |n(t)\rangle, \tag{3.1.7}
\end{aligned}$$

en donde en el último paso se ha considerado la Ec. (3.1.6). Multiplicando ambos lados de la ecuación anterior por $i\hbar$ y considerando la Ec. (3.1.5), se recupera la siguiente ecuación de Schrödinger para los estados en la representación de interacción

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\hat{n}(t)\rangle = \hat{V}(t) |\hat{n}(t)\rangle, \tag{3.1.8}$$

donde $\hat{V}(t) = e^{iH_0 t/\hbar} V(t) e^{-iH_0 t/\hbar}$ es la perturbación en la representación de interacción. Similarmente, es posible escribir la dependencia temporal de los estados en esta representación a partir del operador de evolución temporal, esto es, $|\hat{n}(t)\rangle = \hat{U}(t) |n\rangle$, donde $\hat{U}(t)$ es el operador de evolución en la representación de interacción,

$$\hat{U}(t) = e^{iH_0 t/\hbar} U(t) e^{-iH_0 t/\hbar}. \tag{3.1.9}$$

Entonces, dada la Ec. (3.1.8), el operador de evolución temporal satisface la siguiente ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t) = \hat{V}(t) \hat{U}(t). \tag{3.1.10}$$

Considerando ahora que la perturbación $\hat{V}(t)$ es lo suficientemente pequeña comparada con el hamiltoniano del sistema en equilibrio H_0 , de acuerdo a teoría de

perturbaciones dependiente del tiempo a primer orden en la perturbación, la solución a la ecuación anterior toma la siguiente forma

$$\hat{U}(t) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{V}(t'). \quad (3.1.11)$$

Dado que ya se cuenta con una expresión para el operador de evolución temporal a orden lineal en la perturbación, se procede a estudiar la evolución temporal de $\langle A(t) \rangle$, la cual está dada por

$$\langle A(t) \rangle = \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-E_n/k_B T} \langle n(t) | A | n(t) \rangle. \quad (3.1.12)$$

Considerando la imagen de interacción, es posible escribir los estados $|n(t)\rangle$ como sigue

$$|n(t)\rangle = e^{-iH_0 t/\hbar} |\hat{n}(t)\rangle = e^{-iH_0 t/\hbar} \hat{U}(t) |n\rangle. \quad (3.1.13)$$

Sustituyendo la ecuación anterior en la Ec. (3.1.12) se recupera lo siguiente

$$\langle A(t) \rangle = \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-E_n/k_B T} \langle n | \hat{U}^\dagger(t) e^{iH_0 t/\hbar} A e^{-iH_0 t/\hbar} \hat{U}(t) | n \rangle. \quad (3.1.14)$$

Ahora, sustituyendo la expresión del operador de evolución temporal en Ec. (3.1.11) en la ecuación anterior, la evolución temporal de $\langle A(t) \rangle$ a primer orden en la perturbación toma la siguiente forma

$$\begin{aligned} \langle A(t) \rangle &= \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-E_n/k_B T} \langle n | \left[1 + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{V}(t') \right] \hat{A}(t) \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{V}(t') \right] | n \rangle \\ &\approx \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-E_n/k_B T} \left\{ \langle n | \hat{A}(t) | n \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle n | [\hat{A}(t), \hat{V}(t')] | n \rangle \right\}, \end{aligned} \quad (3.1.15)$$

donde $\hat{A}(t) = e^{iH_0 t/\hbar} A e^{-iH_0 t/\hbar}$ es la cantidad observable en la representación de

interacción, y se han despreciado términos cuadráticos en la perturbación. Resulta conveniente introducir la siguiente notación

$$\langle \mathcal{O} \rangle_0 \equiv \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-E_n/k_B T} \langle n | \mathcal{O} | n \rangle, \quad (3.1.16)$$

esto es, $\langle \mathcal{O} \rangle_0$ representa el valor esperado de un operador $\mathcal{O}$ con respecto al hamiltoniano del sistema en equilibrio H_0 . Con esta nueva notación, la Ec. (3.1.15) se escribe de la siguiente forma

$$\langle A(t) \rangle = \langle \hat{A}(t) \rangle_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle [\hat{A}(t), \hat{V}(t')] \rangle_0. \quad (3.1.17)$$

La ecuación anterior es conocida como *fórmula de Kubo* [83], y es el resultado principal de la teoría de respuesta lineal. Dicha ecuación expresa el valor esperado de una observable $A(t)$ con respecto a un sistema cuántico retirado del equilibrio por una perturbación pequeña $V(t)$, en función de una función de correlación retardada (o causal) del sistema en equilibrio.

3.1.1. Función respuesta para la conductividad óptica

Se desea encontrar una expresión para la respuesta lineal de un sistema de partículas cargadas a una onda electromagnética a frecuencia finita, esto es, la conductividad óptica. Para ello, se considera un sistema de electrones homogéneo bajo la acción de una onda electromagnética plana definida por un potencial vectorial magnético y un

campo eléctrico de la forma

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0 e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \quad (3.1.18)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \quad (3.1.19)$$

respectivamente, donde ω es la frecuencia de la onda y $\mathbf{q}$ su vector de onda, con $|\mathbf{A}_0|$ y $|\mathbf{E}_0|$ la magnitud del potencial vectorial y del campo eléctrico, respectivamente. En teoría de respuesta lineal, la onda electromagnética externa induce una corriente eléctrica en el sistema de partículas cargadas proporcional al campo eléctrico externo, esto es,

$$\langle J_i^e(\omega) \rangle = \sum_j \sigma_{ij}(\omega) E_j(\omega), \quad j = x, y, \quad (3.1.20)$$

donde $\sigma_{ij}(\omega)$ es el tensor de conductividad óptica, el cual expresa la respuesta del sistema en dirección $\hat{e}_i$ a un campo eléctrico en dirección $\hat{e}_j$, donde i, j representan coordenadas espaciales cartesianas. Además, $J_i^e(\omega)$ es el operador cuántico de densidad de corriente eléctrica, por lo que su valor esperado $\langle J_i^e(\omega) \rangle$ es lo que se mide experimentalmente [84]. En el caso más general, cuando el sistema es inhomogéneo, el campo eléctrico externo $\mathbf{E}(\omega)$ induce pequeñas corrientes en el sistema que producen otros campos eléctricos que contribuyen a la conductividad [82]. Tal caso no se está considerando en el presente tratamiento. Ahora, el hamiltoniano de una partícula cargada no relativista bajo la acción de un campo electromagnético tiene la siguiente forma (ver Apéndice B)

$$H(t) = \frac{1}{2m} |\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)|^2, \quad (3.1.21)$$

donde $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ es el operador de momento, m la masa de la partícula y e su carga eléctrica. Despreciando términos cuadráticos del potencial vectorial magnético (dado que se considera que el campo perturbativo es pequeño), el hamiltoniano anterior se puede escribir como la suma del hamiltoniano del sistema en equilibrio $H_0 = |\mathbf{p}|^2/2m$ y el término correspondiente a la perturbación externa,

$$H(t) = \frac{|\mathbf{p}|^2}{2m} - \frac{e}{m}\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad (3.1.22)$$

donde el término correspondiente a la perturbación esta dado por

$$V(t) = -\frac{e}{m}\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t). \quad (3.1.23)$$

El operador cuántico de densidad de corriente eléctrica dado el hamiltoniano en Ec. (3.1.22) tiene la siguiente forma

$$\mathbf{J}^e(\mathbf{r}, t) = \mathbf{J}^P(\mathbf{r}, t) + \mathbf{J}^D(\mathbf{r}, t), \quad (3.1.24)$$

donde el primer término corresponde a la contribución paramagnética, y el segundo a la diamagnética, esto es,

$$\text{Paramagnética:} \quad \mathbf{J}^P(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar e}{m} \text{Im} \{ \psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) \}, \quad (3.1.25)$$

$$\text{Diamagnética:} \quad \mathbf{J}^D(\mathbf{r}, t) = -\frac{e^2}{m} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \rho, \quad (3.1.26)$$

donde $\psi(\mathbf{r}, t)$ es la función de onda asociada a la partícula y $\rho = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ la densidad de probabilidad. La contribución paramagnética es la usual corriente de probabilidad en mecánica cuántica, mientras que la contribución diamagnética aparece como consecuencia del campo electromagnético externo. Dado lo anterior, el valor esperado

de la densidad de corriente eléctrica en dirección $\hat{e}_i$ está dado por

$$\langle J_i^e(t) \rangle = \langle J_i^P(t) \rangle + \langle J_i^D(t) \rangle. \quad (3.1.27)$$

Para estudiar la evolución temporal de la cantidad anterior y así encontrar una expresión para la conductividad óptica, se utiliza la fórmula de Kubo en Ec. (3.1.17) en la ecuación anterior. Sin embargo, de acuerdo a la Ec. (3.1.26), la contribución diamagnética es proporcional a la perturbación, por lo que dentro de la teoría de respuesta lineal el valor esperado de la contribución diamagnética se reduce a tomar el valor esperado de la densidad de probabilidad en el equilibrio, esto es,

$$\langle J_i^D(t) \rangle = -\frac{e^2}{m} A_i(\mathbf{r}, t) \langle \rho \rangle_0. \quad (3.1.28)$$

Ahora, aplicando la fórmula de Kubo al valor esperado de la contribución paramagnética de la densidad de corriente

$$\langle J_i^P(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \left\langle [\hat{J}_i^P(t), \hat{V}(t')] \right\rangle_0, \quad (3.1.29)$$

en donde se ha considerado que el sistema en equilibrio no lleva ninguna corriente, tal que $\langle J_i^P \rangle_0 = 0$. Es posible escribir la perturbación $V(t)$ en Ec. (3.1.23) en términos del operador $\mathbf{J}^P$ considerando que

$$\mathbf{J}^P = e \frac{\partial H_0}{\partial \mathbf{p}} = e \frac{\mathbf{p}}{m}. \quad (3.1.30)$$

Tomando el límite de longitud de onda larga ($\mathbf{q} \rightarrow 0$), el potencial vectorial magnético y el campo eléctrico en Ecs. (3.1.18)-(3.1.19), respectivamente, solamente dependen del tiempo, esto es, $\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_0 e^{-i\omega t}$ y $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t}$. Además, de acuerdo a las

ecuaciones de Maxwell, estas dos cantidades se relacionan de la siguiente manera

$$\mathbf{E}(t) = -\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A}(t) = i\omega\mathbf{A}(t), \quad (3.1.31)$$

Entonces, considerando las Ecs. (3.1.30)-(3.1.31), la perturbación externa se puede escribir de la siguiente forma

$$V(t) = \frac{i}{\omega}\mathbf{J}^P \cdot \mathbf{E}(t). \quad (3.1.32)$$

Considerando lo anterior, la fórmula de Kubo en Ec. (3.1.29) se reescribe como sigue

$$\begin{aligned} \langle J_i^P(t) \rangle &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \left\langle [\hat{J}_i^P(t), \frac{i}{\omega} \hat{\mathbf{J}}^P(t') \cdot \mathbf{E}(t')] \right\rangle_0 \\ &= \frac{1}{\hbar\omega} \sum_j \int_{t_0}^t dt' \left\langle [\hat{J}_i^P(t), \hat{J}_j^P(t')] \right\rangle_0 E_j(t'). \end{aligned} \quad (3.1.33)$$

Además, dado que no se están considerando efectos transitorios, es posible tomar $t_0 \rightarrow -\infty$,

$$\langle J_i^P(t) \rangle = \frac{1}{\hbar\omega} \sum_j \int_{-\infty}^t dt' \left\langle [\hat{J}_i^P(t), \hat{J}_j^P(t')] \right\rangle_0 E_j(t'). \quad (3.1.34)$$

Por otro lado, se desea encontrar una expresión para la conductividad óptica en función de la frecuencia, por lo que se considera la transformada de Fourier del valor esperado de la densidad de corriente

$$\begin{aligned} \langle J_i^e(\omega) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle J_i^e(t) \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle J_i^P(t) \rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle J_i^D(t) \rangle, \end{aligned} \quad (3.1.35)$$

La primera integral del lado derecho de la ecuación anterior corresponde a la transformada de Fourier de la contribución paramagnética, esto es,

$$\begin{aligned}\langle J_i^P(\omega) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle J_i^P(t) \rangle \\ &= \frac{1}{\hbar\omega} \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \int_{-\infty}^t dt' \left\langle [\hat{J}_i^P(t), \hat{J}_j^P(t')] \right\rangle_0 E_j(t').\end{aligned}\quad (3.1.36)$$

Considerando el cambio de variable $t - t' \rightarrow \tau$ se recupera

$$\langle J_i^P(\omega) \rangle = \frac{1}{\hbar\omega} \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \int_0^{\infty} d\tau \left\langle [\hat{J}_i^P(\tau), \hat{J}_j^P(0)] \right\rangle_0 E_j(t - \tau), \quad (3.1.37)$$

Introduciendo ahora el factor $e^{i\omega\tau} e^{-i\omega\tau}$ dentro del integrando

$$\langle J_i^P(\omega) \rangle = \frac{1}{\hbar\omega} \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \int_0^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} e^{-i\omega\tau} \left\langle [\hat{J}_i^P(\tau), \hat{J}_j^P(0)] \right\rangle_0 E_j(t - \tau), \quad (3.1.38)$$

se identifica la transformada de Fourier del campo eléctrico

$$E_j(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega(t-\tau)} E_j(t - \tau). \quad (3.1.39)$$

Entonces, el valor esperado de la contribución paramagnética en función de la frecuencia del campo electromagnético externo toma la siguiente forma

$$\langle J_i^P(\omega) \rangle = \frac{1}{\hbar\omega} \sum_j \int_0^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \left\langle [\hat{J}_i^P(\tau), \hat{J}_j^P(0)] \right\rangle_0 E_j(\omega). \quad (3.1.40)$$

Ahora, considerando la segunda integral del lado derecho de la Ec. (3.1.35), la cual corresponde a la transformada de Fourier de la contribución diamagnética,

$$\begin{aligned}\langle J_i^D(\omega) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle J_i^D(t) \rangle \\ &= -\frac{e^2 n}{m} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} A_i(t),\end{aligned}\quad (3.1.41)$$

donde $n = \langle \rho \rangle_0$ es la densidad de partículas. Escribiendo el potencial vectorial en función del campo eléctrico de acuerdo a la Ec. (3.1.31), el valor esperado de la contribución diamagnética en función de la frecuencia queda de la siguiente manera

$$\begin{aligned}\langle J_i^D(\omega) \rangle &= \frac{ie^2 n}{m\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} E_i(t) \\ &= \frac{ie^2 n}{m\omega} E_i(\omega),\end{aligned}\quad (3.1.42)$$

donde nuevamente se ha identificado la transformada de Fourier del campo eléctrico. Finalmente, de las Ecs. (3.1.40) y (3.1.42), el valor esperado de la densidad de corriente eléctrica toma la siguiente forma

$$\begin{aligned}\langle J_i^e(\omega) \rangle &= \frac{1}{\hbar\omega} \sum_j \int_0^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \langle [\hat{J}_i^P(\tau), \hat{J}_j^P(0)] \rangle_0 E_j(\omega) + \frac{ie^2 n}{m\omega} E_i(\omega) \\ &= \sum_j \left[\frac{1}{\hbar\omega} \int_0^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \langle [\hat{J}_i^P(\tau), \hat{J}_j^P(0)] \rangle_0 + \frac{ie^2 n}{m\omega} \delta_{ij} \right] E_j(\omega).\end{aligned}\quad (3.1.43)$$

Comparando la expresión anterior con la Ec. (3.1.20), se recupera la siguiente expresión para la conductividad óptica en función de la frecuencia del campo electromagnético externo

$$\sigma_{ij}(\omega) = \frac{i}{\tilde{\omega}} \left[\Pi_{ij}(\omega) + \frac{e^2 n}{m} \delta_{ij} \right], \quad (3.1.44)$$

donde

$$\Pi_{ij}(\omega) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty d\tau e^{i\tilde{\omega}\tau} \left\langle [\hat{J}_i^P(\tau), \hat{J}_j^P(0)] \right\rangle_0, \quad (3.1.45)$$

es la función de correlación corriente-corriente. En la expresión anterior se ha introducido un mecanismo de relajación artificial a través de la sustitución $\omega \rightarrow \tilde{\omega} = \omega + i\eta$. El significado físico de la cantidad η radica en el hecho de que la respuesta a la perturbación externa debe decaer cuando $\tau \rightarrow \infty$ debido a algún mecanismo de disipación [85], lo cual hace converger la integral (3.1.45). Eventualmente se debe tomar el límite $\eta \rightarrow 0^+$ al final de los cálculos.

Para un sistema cuántico relativista con un espectro energético sin masa, tal como un sistema de Dirac, la derivación de la conductividad óptica es bastante similar, y se recupera al considerar una pequeña desviación cuadrática en el hamiltoniano del sistema en equilibrio, la cual se hace tender a cero al final de los cálculos (ver Ref. [86]). Esto permite definir una contribución diamagnética adecuada de la densidad de corriente eléctrica en esta clase de sistemas. Además, es posible reescribir la fórmula de Kubo para la conductividad de la siguiente forma [87]

$$\sigma_{ij}(\omega) = \frac{i}{\tilde{\omega}} [\Pi_{ij}(\omega) - \Pi_{ij}(0)], \quad (3.1.46)$$

donde

$$\Pi_{ij}(0) = \lim_{\tilde{\omega} \rightarrow 0} \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty d\tau e^{i\tilde{\omega}\tau} \left\langle [\hat{J}_i^P(\tau), \hat{J}_j^P(0)] \right\rangle_0, \quad (3.1.47)$$

tal que al comparar con la Ec. (3.1.44), se observa que el término $-(i/\tilde{\omega})\Pi_{ij}(0)$ corresponde a la contribución diamagnética. La expresión en Ec. (3.1.46) resulta conveniente para evaluar la respuesta de un sistema de Dirac a un campo electromagnético.

Tensor de conductividad óptica en su forma espectral

La fórmula de Kubo para la conductividad óptica se puede reescribir en su forma espectral desarrollando la función de correlación corriente-corriente en Ec. (3.1.45). Para ello, se escribe explícitamente el valor esperado del conmutador en el equilibrio

$$\Pi_{ij}(\omega) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \sum_{\lambda, \mathbf{k}} f(\varepsilon_\lambda) \langle \psi_\lambda(\mathbf{k}) | [\hat{J}_i^P(t), \hat{J}_j^P(0)] | \psi_\lambda(\mathbf{k}) \rangle, \quad (3.1.48)$$

donde

$$f(\varepsilon_\lambda) = \frac{1}{e^{(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_F)/k_B T} + 1}, \quad (3.1.49)$$

es la función de distribución de Fermi-Dirac, la cual es utilizada para describir Fermiones, tal como electrones, y $\varepsilon_\lambda = \varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$ son los eigenvalores del hamiltoniano del sistema en equilibrio, con los correspondientes eigenestados denotados como $|\psi_\lambda(\mathbf{k})\rangle$. Escribiendo la suma en $\mathbf{k}$ como una integral

$$\Pi_{ij}(\omega) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_\lambda f(\varepsilon_\lambda) \langle \psi_\lambda(\mathbf{k}) | [\hat{J}_i^P(t), \hat{J}_j^P(0)] | \psi_\lambda(\mathbf{k}) \rangle. \quad (3.1.50)$$

Haciendo la integral en el tiempo, la función de correlación toma la siguiente forma

$$\Pi_{ij}(\omega) = e^2 \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_{\lambda', \lambda} (f(\varepsilon_\lambda) - f(\varepsilon_{\lambda'})) \frac{\langle \psi_\lambda(\mathbf{k}) | v_i | \psi_{\lambda'}(\mathbf{k}) \rangle \langle \psi_{\lambda'}(\mathbf{k}) | v_j | \psi_\lambda(\mathbf{k}) \rangle}{\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'} + \hbar\tilde{\omega}}, \quad (3.1.51)$$

donde se ha considerado el operador de velocidad $v_i = (1/e)J_i^P$ de acuerdo a la Ec. (3.1.30). Considerando la ecuación anterior en la fórmula de Kubo en Ec. (3.1.46),

se recupera la siguiente expresión para la conductividad óptica

$$\sigma_{ij}(\omega) = -ie^2\hbar \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_{\lambda', \lambda} \left(\frac{f(\varepsilon_\lambda) - f(\varepsilon_{\lambda'})}{\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}} \right) \frac{\langle \psi_\lambda(\mathbf{k}) | v_i | \psi_{\lambda'}(\mathbf{k}) \rangle \langle \psi_{\lambda'}(\mathbf{k}) | v_j | \psi_\lambda(\mathbf{k}) \rangle}{\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'} + \hbar\tilde{\omega}}. \quad (3.1.52)$$

Para visualizar mejor las distintas contribuciones que participan en la conductividad óptica, resulta conveniente reescribir la ecuación anterior como la suma de la conductividad intrabanda y la conductividad interbanda expandiendo la suma en λ, λ' de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}(\omega) &= -ie^2\hbar \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_{\lambda} \lim_{\lambda' \rightarrow \lambda} \left(\frac{f(\varepsilon_\lambda) - f(\varepsilon_{\lambda'})}{\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}} \right) \frac{\langle \psi_\lambda(\mathbf{k}) | v_i | \psi_{\lambda'}(\mathbf{k}) \rangle \langle \psi_{\lambda'}(\mathbf{k}) | v_j | \psi_\lambda(\mathbf{k}) \rangle}{\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'} + \hbar\tilde{\omega}} \\ &\quad - ie^2\hbar \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_{\substack{\lambda', \lambda \\ \lambda' \neq \lambda}} \left(\frac{f(\varepsilon_\lambda) - f(\varepsilon_{\lambda'})}{\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}} \right) \frac{\langle \psi_\lambda(\mathbf{k}) | v_i | \psi_{\lambda'}(\mathbf{k}) \rangle \langle \psi_{\lambda'}(\mathbf{k}) | v_j | \psi_\lambda(\mathbf{k}) \rangle}{\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'} + \hbar\tilde{\omega}} \\ &= \sigma_{ij}^{intra}(\omega) + \sigma_{ij}^{inter}(\omega), \end{aligned} \quad (3.1.53)$$

tal que $\sigma_{ij}^{intra}(\omega)$ denota la contribución intrabanda de la conductividad, la cual está dada por

$$\sigma_{ij}^{intra}(\omega) = i \frac{e^2}{\tilde{\omega}} \sum_{\lambda} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left(-\frac{\partial f(\varepsilon_\lambda)}{\partial \varepsilon_\lambda} \right) \langle \psi_\lambda(\mathbf{k}) | v_i | \psi_\lambda(\mathbf{k}) \rangle \langle \psi_\lambda(\mathbf{k}) | v_j | \psi_\lambda(\mathbf{k}) \rangle, \quad (3.1.54)$$

donde se ha considerado el límite $\lambda' \rightarrow \lambda$ de $(f(\varepsilon_\lambda) - f(\varepsilon_{\lambda'}))/(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'})$ como la derivada parcial $\partial f(\varepsilon_\lambda)/\partial \varepsilon_\lambda$. Tomando ahora el límite $\eta \rightarrow 0^+$ en la ecuación anterior, es posible reescribir la contribución intrabanda de la siguiente forma

$$\sigma_{ij}^{intra}(\omega) = D_{ij} \delta(\omega) + i \text{Im} \sigma_{ij}^{intra}(\omega), \quad (3.1.55)$$

donde, por las relaciones de Kramers-Kronig, el peso de Drude D_{ij} está dado por $D_{ij} = \pi \lim_{\omega \rightarrow 0} [\omega \text{Im} \sigma_{ij}^{intra}(\omega)]$. La conductividad intrabanda describe las transiciones

dentro de una misma banda de energía justamente en el nivel de Fermi, la cual se manifiesta a frecuencias pequeñas y decae como $1/\omega$.

Finalmente, la contribución interbanda de la conductividad denotada como $\sigma_{ij}^{inter}(\omega)$ en Ec. (3.1.53) tiene la siguiente forma

$$\sigma_{ij}^{inter}(\omega) = -ie^2\hbar \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_{\substack{\lambda', \lambda \\ \lambda' \neq \lambda}} \left(\frac{f(\varepsilon_\lambda) - f(\varepsilon_{\lambda'})}{\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}} \right) \frac{\langle \psi_\lambda(\mathbf{k}) | v_i | \psi_{\lambda'}(\mathbf{k}) \rangle \langle \psi_{\lambda'}(\mathbf{k}) | v_j | \psi_\lambda(\mathbf{k}) \rangle}{\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'} + \hbar\tilde{\omega}}. \quad (3.1.56)$$

Este tipo de contribución está relacionada con la absorción de la energía del fotón incidente, dando lugar a transiciones verticales de un estado ocupado a uno desocupado. La expresión anterior será utilizada para calcular la conductividad interbanda de sistemas de Dirac en el Capítulo 5.

3.2. Conductividad Hall

Como se discutió anteriormente, en un sistema homogéneo e isotrópico un campo eléctrico externo genera una corriente en la misma dirección del campo, conocida como corriente de deriva. Sin embargo, es posible generar una polarización de carga transversal al campo eléctrico, comúnmente asociada con la presencia de un campo magnético uniforme normal al sistema. El campo magnético externo genera una fuerza de Lorentz sobre los electrones, los cuales tienden a moverse en dirección perpendicular al campo eléctrico que los acelera. Este fenómeno es conocido como *efecto Hall*, el cual es útil para medir la densidad de los portadores de carga en el sistema y para fabricar sensores de efecto Hall encargados de detectar campos magnéticos [84].

De manera más fundamental, la respuesta Hall en el sistema resulta del rom-

pimiento de la simetría de inversión temporal [81]. Un campo magnético rompe la simetría de inversión temporal, generando una polarización transversal a la corriente de deriva. Sin embargo, existen otros mecanismos capaces de romper dicha simetría en ausencia de un campo magnético externo, tal como la presencia de impurezas magnéticas o sustratos ferromagnéticos, lo cual introduce un flujo magnético periódico local normal al sistema con un flujo total nulo a través de la celda unitaria. Esto abre la posibilidad de generar una respuesta Hall en el sistema sin la necesidad de un campo magnético externo, dando lugar a un *efecto Hall anómalo*.

Para el cálculo de la conductividad Hall a partir de la fórmula de Kubo, se consideran las componentes fuera de la diagonal del tensor de conductividad $\sigma_{xy}(\omega) = \sigma_{xy}^{inter}(\omega)$. La contribución intrabanda de la respuesta Hall es por lo general despreciable, ya que ésta proviene de la contribución diamagnética, la cual forma parte de las componentes en la diagonal del tensor (ver Ec. (3.1.44)). Entonces, de la Ec. (3.1.56), la conductividad Hall queda determinada por

$$\sigma_{xy}(\omega) = -ie^2\hbar \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_{\substack{\lambda', \lambda \\ \lambda' \neq \lambda}} \left(\frac{f(\varepsilon_\lambda) - f(\varepsilon_{\lambda'})}{\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}} \right) \frac{\langle \psi_\lambda(\mathbf{k}) | v_x | \psi_{\lambda'}(\mathbf{k}) \rangle \langle \psi_{\lambda'}(\mathbf{k}) | v_y | \psi_\lambda(\mathbf{k}) \rangle}{\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'} + \hbar\tilde{\omega}}. \quad (3.2.1)$$

La expresión anterior describe la respuesta del sistema en dirección $\hat{\mathbf{y}}$ a un campo eléctrico en dirección $\hat{\mathbf{x}}$. Tomando el límite de frecuencia cero, se recupera la siguiente expresión para la conductividad Hall anómala [88]

$$\sigma_{xy}(0) = -\frac{e^2}{\hbar} \sum_{\lambda} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} f(\varepsilon_\lambda) \Omega_{\lambda,z}(\mathbf{k}), \quad (3.2.2)$$

donde

$$\Omega_{\lambda,z}(\mathbf{k}) = i\hbar^2 \sum_{\lambda' \neq \lambda} \frac{\langle \psi_{\lambda}(\mathbf{k}) | v_x | \psi_{\lambda'}(\mathbf{k}) \rangle \langle \psi_{\lambda'}(\mathbf{k}) | v_y | \psi_{\lambda}(\mathbf{k}) \rangle - (x \leftrightarrow y)}{(\varepsilon_{\lambda} - \varepsilon_{\lambda'})^2}, \quad (3.2.3)$$

es la *curvatura de Berry* [89], la cual es una manifestación local de las propiedades geométricas de las funciones de onda en el espacio de parámetros, en este caso el espacio de momentos. La expresión en Ec. (3.2.2) refleja la contribución intrínseca de la conductividad Hall anómala, la cual es únicamente dependiente de las propiedades topológicas de la estructura de bandas a través de la curvatura de Berry [90].

3.3. Ecuación de transporte de Boltzmann

El estudio de fenómenos de transporte dentro de la física de la materia condensada es frecuentemente abordado utilizando la teoría semiclásica de Boltzmann [84]. Entre las propiedades físicas capaces de ser exploradas utilizando esta teoría se encuentran, por ejemplo, la conductividad térmica inducida por un gradiente de temperatura, la resistividad eléctrica, y la viscosidad en un fluido. Además, el transporte de electrones en gases ionizados y en sólidos es estudiado en la mayoría de los casos utilizando la ecuación de Boltzmann. Muchos resultados disponibles de la conducción de electrones en semiconductores son derivados de tal ecuación con un gran acuerdo con los resultados experimentales.

En un sistema constituido por un gran número de partículas, los promedios de las cantidades macroscópicas son determinados por el comportamiento microscópico de las partículas que constituyen el sistema. Dado que el estudio de cada constituyente es un problema intratable, se recurre a su comportamiento estadístico al momento

de evaluar las cantidades macroscópicas de interés [91], tal como la conductividad eléctrica.

Para el estudio del transporte electrónico en un sólido, se recurre a la función de distribución de los electrones en el sistema. Al aplicar un campo eléctrico externo, éste acelera a los portadores de carga en dirección contraria, alterando la función de distribución. Uno de los mecanismos más importantes que contribuyen a la conductividad eléctrica a bajas temperaturas es la dispersión por impurezas, y gracias a que éstas se pueden considerar como estáticas y simétricas, las colisiones entre los electrones y las impurezas son completamente elásticas, lo cual es importante desde un punto de vista experimental. Además, la población de fonones no se ve afectada, ya que la transferencia de momento a los fonones es suficientemente pequeña. Otro aspecto a considerar en el transporte es que las interacciones entre electrones a través de la fuerza de Coulomb pueden afectar ciertamente el movimiento de éstos. Sin embargo, este tipo de interacciones sólo cobra importancia en sistemas con una alta densidad de electrones. Dadas estas consideraciones, el número de electrones dispersados de un punto a otro en el espacio de momentos está completamente determinado por la función de distribución, la cual es suficiente para describir el transporte electrónico.

La función de distribución f en su forma más general depende de la posición, el momento y el tiempo [92], esto es, $f = f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$. De acuerdo al teorema de Liouville, la función de distribución permanece constante a lo largo de una línea de flujo o trayectoria del sistema, esto es, la densidad de puntos del sistema en la vecindad de algún punto del sistema viajando en el espacio fase es constante con el tiempo, lo

cual se puede expresar de la siguiente forma

$$f(\mathbf{k} + d\mathbf{k}, \mathbf{r} + d\mathbf{r}, t + dt) = f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t). \quad (3.3.1)$$

Al considerar colisiones debido a impurezas, la función de distribución se ve alterada, tal que

$$f(\mathbf{k} + d\mathbf{k}, \mathbf{r} + d\mathbf{r}, t + dt) - f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = -dt \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{col}}, \quad (3.3.2)$$

donde el término $(\partial_t f)_{\text{col}}$ indica la tasa de cambio debido a los procesos de colisión. Ahora, se identifica el diferencial total de la función de distribución del lado izquierdo de la ecuación anterior, esto es,

$$df = dt \frac{\partial f}{\partial t} + d\mathbf{r} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + d\mathbf{k} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f + dt \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{col}} = 0. \quad (3.3.3)$$

Entonces

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{d\mathbf{k}}{dt} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{col}} = 0. \quad (3.3.4)$$

La ecuación anterior es conocida como *ecuación de transporte de Boltzmann*, la cual gobierna el cambio en el tiempo de la función de distribución f . A pesar de la falta de rigurosidad en la derivación de la ecuación de Boltzmann, ésta se toma como empíricamente bien justificada gracias a la concordancia entre las predicciones de esta teoría y los resultados experimentales.

3.3.1. Ecuación linealizada: corriente eléctrica

Para derivar una expresión de la corriente eléctrica a partir de la teoría de Boltzmann, se considera un sistema bidimensional homogéneo con impurezas aleatoriamente localizadas. Al aplicar un campo eléctrico $\mathbf{E}$ independiente del tiempo, se

genera una corriente estacionaria en el medio. Consecuentemente, la función de distribución $f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$ que describe a los electrones en el sistema es independiente de la posición $\mathbf{r}$ (homogeneidad) y del tiempo t (flujo estacionario), por lo que solo depende del momento $\mathbf{k}$, esto es, $f = f(\mathbf{k})$ [84]. Bajo estas consideraciones, la ecuación de transporte de Boltzmann en Ec. (3.3.4) se reduce a lo siguiente

$$\frac{d\mathbf{k}}{dt} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) + \left(\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right)_{\text{col}} = 0. \quad (3.3.5)$$

La ecuación de movimiento semiclásica para un electrón en un estado de Bloch $\mathbf{k}$ sujeto a un campo electromagnético (o fuerza de Lorentz) tiene la siguiente forma [92]

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}), \quad (3.3.6)$$

donde $\mathbf{B}$ es el campo magnético y $\mathbf{v}$ la velocidad del electrón. Sustituyendo la ecuación anterior en la Ec. (3.3.5), y considerando que no hay campo magnético, se recupera lo siguiente

$$-\frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) + \left(\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right)_{\text{col}} = 0. \quad (3.3.7)$$

A continuación se considera un mecanismo de relajación que involucra la introducción de un tiempo de relajación $\tau(\mathbf{k})$ en el término de colisión. Para ello, se asume que la función de distribución $f(\mathbf{k})$ tiende a regresar a su estado de equilibrio (en ausencia de un campo eléctrico externo), definido por una función de distribución $f_0(\mathbf{k})$, como consecuencia de las colisiones con impurezas. Entonces, el cambio en el tiempo de $f(\mathbf{k})$ debido a colisiones es proporcional a la diferencia entre $f(\mathbf{k})$ y $f_0(\mathbf{k})$, esto es,

$$\left(\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right)_{\text{col}} = -\frac{f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k})}{\tau(\mathbf{k})}. \quad (3.3.8)$$

Esta ecuación define el tiempo de relajación para transporte [84]. Sustituyendo la relación anterior en la Ec. (3.3.7), se recupera la siguiente ecuación diferencial para la función de distribución

$$f(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) - \frac{e}{\hbar} \tau(\mathbf{k}) \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}). \quad (3.3.9)$$

Además, considerando que la magnitud del campo eléctrico externo es pequeña, el cambio que sufre $f(\mathbf{k})$ también es pequeño, por lo que la función de distribución se evalúa a primer orden en el campo eléctrico. Dado esto, es posible aproximar $\nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \approx \nabla_{\mathbf{k}} f_0(\mathbf{k})$. Entonces,

$$f(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) - \frac{e}{\hbar} \tau(\mathbf{k}) \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_0(\mathbf{k}). \quad (3.3.10)$$

Considerando ahora la regla de la cadena

$$\nabla_{\mathbf{k}} f_0(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = \hbar \mathbf{v}(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}, \quad (3.3.11)$$

donde $\varepsilon(\mathbf{k})$ denota el espectro de energía y $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = (1/\hbar) \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k})$ es la velocidad de grupo. Finalmente, se recupera la siguiente expresión para la función de distribución a primer orden en el campo eléctrico

$$f(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) - e \tau(\mathbf{k}) (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k})) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}. \quad (3.3.12)$$

Para el cálculo de la corriente eléctrica, se considera el valor esperado del operador de densidad de corriente. De acuerdo a la Ec. (3.1.30)

$$\langle \mathbf{J} \rangle = e \langle \mathbf{v} \rangle = e \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}), \quad (3.3.13)$$

donde se ha promediado sobre la función de distribución de los electrones. Cambiando la suma en $\mathbf{k}$ por una integral en dos dimensiones

$$\langle \mathbf{J} \rangle = e \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} f(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}). \quad (3.3.14)$$

Sustituyendo la función de distribución en Ec. (3.3.12) en la ecuación anterior se obtiene lo siguiente

$$\langle \mathbf{J} \rangle = e \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left(f_0(\mathbf{k}) - e \tau(\mathbf{k}) (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k})) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \mathbf{v}(\mathbf{k}). \quad (3.3.15)$$

El término dentro del integrando que involucra $f_0(\mathbf{k})$ da el valor esperado de la corriente eléctrica en el equilibrio, el cual se anula ya que se asume que no hay corriente antes de aplicar el campo eléctrico externo. Por lo tanto, se recupera la siguiente expresión para la densidad de corriente eléctrica

$$\langle \mathbf{J} \rangle = e^2 \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \tau(\mathbf{k}) (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k})) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right). \quad (3.3.16)$$

La ecuación anterior es el resultado principal de la teoría de Boltzmann aplicada al estudio de la corriente eléctrica en un medio homogéneo a primer orden en el campo eléctrico externo. La conductividad eléctrica se recupera a través de la ley de Ohm (ver Ec. (3.1.20)), y ya que se está considerando que el medio es homogéneo e isotrópico, la corriente fluye en la misma dirección que el campo eléctrico.

Como se discutió anteriormente, la función de distribución adecuada para describir electrones es la distribución de Fermi-Dirac en Ec. (3.1.49). A temperatura cero, tal distribución toma la forma de una función escalón unitaria. Por lo tanto, la densidad de corriente eléctrica a temperatura cero queda determinada por la siguiente

expresión

$$\langle \mathbf{J} \rangle = e^2 \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \tau(\mathbf{k}) (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k})) \delta(\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon_F). \quad (3.3.17)$$

La ecuación anterior será utilizada en el Capítulo 4 para calcular la corriente eléctrica de grafeno con distorsión Kekulé bajo radiación electromagnética.

3.3.2. Tiempo de relajación

El concepto de tiempo de relajación es ampliamente utilizado en física para describir mecanismos que involucran el regreso al estado de equilibrio de un sistema perturbado. En física de la materia condensada, resulta bastante útil ya que permite entender el transporte electrónico en sólidos. Para recuperar una expresión del tiempo de relajación $\tau(\mathbf{k})$ introducido anteriormente en la ecuación de Boltzmann para la corriente eléctrica (ver Ec. (3.3.16)), se parte de la definición del tiempo de relajación en Ec. (3.3.8). De dicha ecuación es posible concluir que $\tau(\mathbf{k})$, al igual que la función de distribución, debe depender de la perturbación externa, así como de la geometría de las bandas de energía, ya que el tiempo de relajación es precisamente un funcional de la función de distribución [93]. El cambio en el tiempo de $f(\mathbf{k})$ debido a dispersiones fue denotado anteriormente como $(\partial_t f(\mathbf{k}))_{\text{col}}$, el cual también se puede entender como la tasa de dispersión de un electrón de ir de un estado $\mathbf{k}$ a un estado $\mathbf{k}'$, la cual es proporcional a $f(\mathbf{k})[1 - f(\mathbf{k}')] - f(\mathbf{k}')[1 - f(\mathbf{k})]$, menos la tasa de ir de un estado $\mathbf{k}'$ a un estado $\mathbf{k}$, la cual es proporcional a $f(\mathbf{k}')[1 - f(\mathbf{k})]$, esto es [84],

$$-\left(\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t}\right)_{\text{col}} = \frac{f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k})}{\tau(\mathbf{k})} = A \int \frac{d^2 k'}{(2\pi)^2} \{w_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} f(\mathbf{k})[1 - f(\mathbf{k}')] - w_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} f(\mathbf{k}')[1 - f(\mathbf{k})]\}, \quad (3.3.18)$$

donde A es el área de la muestra y $w_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ la probabilidad de que un electrón en un estado $\mathbf{k}$ sea dispersado horizontalmente (con la misma energía) a un estado $\mathbf{k}'$. En

ausencia de campo eléctrico externo (fuerzas de aceleración), el término de colisión anterior se anula, lo que significa que el número de electrones dispersados de un estado $\mathbf{k}$ a un estado $\mathbf{k}'$, es igual al número de electrones dispersados de un estado $\mathbf{k}'$ a un estado $\mathbf{k}$ [91].

Como se discutió anteriormente, las impurezas en el sólido son estáticas y simétricas, además de no tener excitaciones internas, tal que los portadores de carga son dispersados elásticamente, por lo que se debe cumplir $w_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = w_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$. Entonces, la Ec. (3.3.18) se reescribe de la siguiente forma

$$\frac{f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k})}{\tau(\mathbf{k})} = A \int \frac{d^2k'}{(2\pi)^2} [f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k}')] w_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}. \quad (3.3.19)$$

Debido a las impurezas presentes en el sistema, un electrón con momento inicial $\mathbf{k}$ es dispersado elásticamente con un momento final $\mathbf{k}'$. Solamente los electrones con un momento inicial en el contorno de Fermi pueden ser dispersados, ya que por debajo de la energía de Fermi todos los estados están ocupados, y por arriba de ésta no hay electrones excitados. Además, por tratarse de colisiones elásticas, la energía de los electrones se conserva al momento de la colisión, por lo que los vectores de onda $\mathbf{k}$ y $\mathbf{k}'$ están confinados al contorno de Fermi, esto es, $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}') = \varepsilon_F$. Dado esto, y considerando que la función de distribución en el equilibrio $f_0(\mathbf{k})$ solamente depende de la energía del sistema, se concluye que $f_0(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}')$. Entonces, es posible reescribir la Ec. (3.3.19) de la siguiente forma

$$\frac{f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k})}{\tau(\mathbf{k})} = A \int \frac{d^2k'}{(2\pi)^2} [f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k}) - (f(\mathbf{k}') - f_0(\mathbf{k}'))] w_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}. \quad (3.3.20)$$

Sustituyendo en la ecuación anterior la función de distribución en Ec. (3.3.12) que se recuperó a partir de la ecuación de Boltzmann, se obtiene la siguiente expresión

para el tiempo de relajación

$$\frac{1}{\tau(\mathbf{k})} = A \int \frac{d^2 k'}{(2\pi)^2} \left[1 - \frac{\tau(\mathbf{k}') (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}'))}{\tau(\mathbf{k}) (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}))} \right] w_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}. \quad (3.3.21)$$

La ecuación integral anterior es exacta dentro de la teoría de transporte de Boltzmann para el caso de colisiones elásticas [94].

Capítulo 4

Grafeno con distorsión Kekulé bajo radiación electromagnética

4.1. Espectro de Floquet

En el Capítulo 2 se proporcionó una breve descripción de varios sistemas de Dirac bidimensionales de actual interés. Entre ellos, se discutieron las propiedades electrónicas del grafeno con una distribución periódica de enlaces fuertes y débiles, conocido como grafeno con distorsión Kekulé. En este sistema, la celda unitaria es tres veces mayor que la del grafeno prístino, tal que la primera zona de Brillouin se dobla hacia el centro acoplando los conos de Dirac. Además, se introdujo el hamiltoniano a bajas energías de las dos fases de distorsión Kekulé; la textura Kek-Y ($\nu = \pm 1$) y la textura Kek-O ($\nu = 0$).

Para el estudio del espectro energético de grafeno con distorsión Kekulé bajo incidencia normal de radiación electromagnética se introduce un acoplamiento mínimo

$\mathbf{p} \rightarrow \boldsymbol{\pi}(t) = \mathbf{p} - e\mathbf{A}(t)$ (ver Apéndice B) en el hamiltoniano a bajas energías en Ec. (2.2.4), donde $\mathbf{A}(t) = (A_x(t), A_y(t))$ es el potencial vectorial magnético, el cual es una función periódica del tiempo con periodo $T = 2\pi/\Omega$, con Ω la frecuencia angular de la onda electromagnética externa. El potencial vectorial anterior corresponde a una onda electromagnética propagándose perpendicular al plano XY en donde se encuentra la capa de grafeno. Dado esto, el hamiltoniano de grafeno con distorsión Kekulé irradiado toma la siguiente forma

$$H(t) = \begin{pmatrix} v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}(t) & \tilde{\Delta} Q_\nu(t) \\ \tilde{\Delta}^* Q_\nu^\dagger(t) & v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}(t) \end{pmatrix}, \quad (4.1.1)$$

donde el operador que mezcla los valles $Q_\nu(t)$ es ahora una función del tiempo, el cual está dado por

$$Q_\nu(t) = \begin{cases} 3t_0\sigma_z & \text{si } \nu = 0, \\ v_F(\nu\pi_x(t) - i\pi_y(t))\sigma_0 & \text{si } \nu = \pm 1, \end{cases} \quad (4.1.2)$$

donde $\pi_x(t) = p_x - eA_x(t)$ y $\pi_y(t) = p_y - eA_y(t)$. Se observa que para $\nu = 0$ el operador Q_ν permanece invariante. Además, el hamiltoniano en Ec. (4.1.1) es también una función periódica del tiempo, con periodo igual al del campo electromagnético externo. Para el estudio de la dinámica de los portadores de carga en este sistema irradiado se parte de la ecuación de Dirac

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{k}, t) = H(t) \Psi(\mathbf{k}, t), \quad (4.1.3)$$

donde $\Psi(\mathbf{k}, t)$ es un espinor de cuatro componentes a determinar, el cual contiene las amplitudes de onda en las subredes A y B para los valles K y K' . Resulta conveniente

escribir el hamiltoniano en Ec. (4.1.1) como la suma del hamiltoniano en su estado base en Ec. (2.2.4) (denotado aquí como H_0), y la parte dependiente del tiempo, esto es,

$$H(t) = H_0 + V(t), \quad (4.1.4)$$

donde

$$V(t) = \begin{pmatrix} -ev_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}(t) & \tilde{\Delta} W_\nu(t) \\ \tilde{\Delta}^* W_\nu^\dagger(t) & -ev_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}(t) \end{pmatrix}, \quad (4.1.5)$$

con el operador $W_\nu(t)$ definido como

$$W_\nu(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } \nu = 0, \\ v_F (\nu A_x(t) - i A_y(t)) \sigma_0 & \text{si } \nu = \pm 1. \end{cases} \quad (4.1.6)$$

Como se mencionó anteriormente, el hamiltoniano es una función periódica del tiempo, por lo que para derivar el espectro de grafeno con distorsión Kekulé sujeto a una onda electromagnética se utiliza el teorema de Floquet (ver Apéndice C). A partir de este teorema se deduce que la solución a la ecuación de Dirac en Ec. (4.1.3) es del tipo $\Psi(\mathbf{k}, t) = e^{-i\varepsilon t/\hbar} \Phi(\mathbf{k}, t)$, donde $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$ se le conoce como *cuasienergía*, análogo al cuasimomento en el teorema de Bloch, y $\Phi(\mathbf{k}, t)$ es una función periódica del tiempo con el mismo periodo que el de la onda electromagnética externa, conocido como modo de Floquet. El tratamiento que se seguirá a continuación consiste en proponer soluciones de la forma [40]

$$\Psi(\mathbf{k}, t) = e^{-i\varepsilon t/\hbar} \sum_{n=1}^4 a_n(\mathbf{k}, t) \varphi_n(t), \quad (4.1.7)$$

con los coeficientes $a_m(\mathbf{k}, t)$ ($m \in \{1, 2, 3, 4\}$) a determinar, y donde $\varphi_m(t)$ son vec-

tores de cuatro componentes, soluciones de la siguiente ecuación diferencial

$$i\hbar \frac{d}{dt} \varphi_m(t) = V(t) \varphi_m(t), \quad (4.1.8)$$

con $V(t)$ dado en Ec. (4.1.5). Dada la forma de la propuesta en Ec. (4.1.7), el modo de Floquet correspondiente tiene la siguiente forma

$$\Phi(\mathbf{k}, t) = \sum_{n=1}^4 a_n(\mathbf{k}, t) \varphi_n(t). \quad (4.1.9)$$

Sustituyendo la propuesta en la ecuación de Dirac, se recupera el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales acopladas para los coeficientes $a_m(\mathbf{k}, t)$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_m(\mathbf{k}, t) = \sum_{n=1}^4 \mathbb{H}_{mn}(t) a_n(\mathbf{k}, t) - \varepsilon a_m(\mathbf{k}, t). \quad (4.1.10)$$

donde $\mathbb{H}_{mn}(t) = \varphi_m^\dagger(t) H_0 \varphi_n(t)$. Para determinar la forma de los espinores $\Psi(\mathbf{k}, t)$ y de las cuasienergías $\varepsilon(\mathbf{k})$, se considera primero que la onda electromagnética externa se encuentra circularmente polarizada. Después, se considera el caso de polarización lineal.

4.1.1. Excitación con radiación circularmente polarizada

Como se mencionó anteriormente, se está considerando una onda electromagnética viajando normal al plano XY , por lo que su fase es del tipo $Qz - \Omega t$, donde Q es su vector de onda. Es posible suponer que la capa de grafeno es completamente bidimensional, por lo que se puede despreciar la tercera dimensión tomando $z = 0$. Entonces, considerando que la onda externa se encuentra circularmente polarizada,

el potencial vectorial magnético toma la siguiente forma

$$\mathbf{A}(t) = \frac{E_0}{\Omega} (\cos(\Omega t), \sin(\Omega t)), \quad (4.1.11)$$

donde E_0 es la amplitud del campo eléctrico. El campo eléctrico correspondiente dado el potencial vectorial magnético anterior se recupera de la siguiente forma de acuerdo a las ecuaciones de Maxwell

$$\mathbf{E}(t) = -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(t) = E_0 (\sin(\Omega t), -\cos(\Omega t)). \quad (4.1.12)$$

Habiendo planteado lo anterior, a continuación se procede a estudiar los espectros de Floquet de grafeno con distorsión Kek-Y y grafeno con distorsión Kek-O baja luz circularmente polarizada.

Textura Kek-Y

Se considera primero grafeno con distorsión Kek-Y con $\nu = 1$ y un parámetro de Kekulé real, esto es, $\tilde{\Delta} = \Delta_0$. El caso con $\nu = -1$ y un $\tilde{\Delta}$ complejo es equivalente bajo una transformación unitaria [17]. Entonces, la ecuación diferencial en Ec. (4.1.8) toma la siguiente forma

$$i\hbar \frac{d}{dt} \varphi_m(t) = -e v_F \left[(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}(t)) \otimes \mu_0 + \Delta_0 \sigma_0 \otimes (\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{A}(t)) \right] \varphi_m(t), \quad (4.1.13)$$

donde se ha introducido un nuevo conjunto de matrices de Pauli μ_i , el cual actúa sobre el grado de libertad de valle o isoespín, y donde $\mathbf{A}(t)$ está dado en Ec. (4.1.11). Dado que la ecuación diferencial anterior es del tipo $\dot{x}(t) = L(t)x(t)$, donde $L(t)$ es una función periódica del tiempo, es posible hacer uso del teorema de Floquet para

resolver dicha ecuación. Después de hacer los correspondientes cálculos se encuentra que los vectores $\varphi_m(t)$ tienen la siguiente forma

$$\varphi_m(t) = \varphi_{\xi,\eta}(t) = \frac{e^{i\eta(\alpha+\xi\beta)t/2\hbar}}{2\sqrt{\alpha\beta}} \begin{pmatrix} \xi e^{-i\Omega t} \sqrt{(\alpha + \eta\hbar\Omega)(\beta + \xi\eta\hbar\Omega)} \\ \xi\eta \sqrt{(\alpha - \eta\hbar\Omega)(\beta + \xi\eta\hbar\Omega)} \\ \eta \sqrt{(\alpha + \eta\hbar\Omega)(\beta - \xi\eta\hbar\Omega)} \\ e^{i\Omega t} \sqrt{(\alpha - \eta\hbar\Omega)(\beta - \xi\eta\hbar\Omega)} \end{pmatrix}, \quad (4.1.14)$$

con $\xi = \pm$ y $\eta = \pm$, donde se ha definido

$$\alpha = \hbar\Omega \sqrt{1 + (2\tilde{E})^2}, \quad (4.1.15)$$

$$\beta = \hbar\Omega \sqrt{1 + (2\Delta_0\tilde{E})^2}, \quad (4.1.16)$$

con

$$\tilde{E} = \frac{eE_0v_F}{\hbar\Omega^2}, \quad (4.1.17)$$

una cantidad adimensional. Además, los vectores $\varphi_m(t)$ se denotan de la siguiente manera: $\varphi_1(t) = \varphi_{+,+}(t)$, $\varphi_2(t) = \varphi_{-,-}(t)$, $\varphi_3(t) = \varphi_{-,+}(t)$ y $\varphi_4(t) = \varphi_{+,-}(t)$. Dados los vectores en Ec. (4.1.14), el siguiente paso es pasar a resolver el sistema de ecuaciones diferenciales en Ec. (4.1.10). Desafortunadamente no es posible resolver analíticamente tal sistema de ecuaciones para cualquier amplitud y frecuencia del campo eléctrico externo, por lo que se sigue el procedimiento estándar utilizado en el estudio de sistemas cuánticos bidimensionales irradiados [40], el cual consiste en pedir $\tilde{E} \ll 1$, o de igual forma

$$\left(\frac{ev_F}{\Omega}\right) E_0 \ll \hbar\Omega. \quad (4.1.18)$$

La expresión anterior se puede entender como una interacción débil entre el campo eléctrico externo y el momento dipolar inducido ev/Ω en comparación con la energía de un fotón $\hbar\Omega$. Bajo estas consideraciones, es posible aproximar $\alpha \approx \beta \approx \hbar\Omega$ en las amplitudes de los vectores en Ec. (4.1.14), pero manteniendo la expresión exacta en la fase de la exponencial compleja, ya que éste es un factor oscilante. Consecuentemente, la matriz $\mathbb{H}(t)$ en Ec. (4.1.10) toma la siguiente forma

$$\mathbb{H}(t) = v_F \hbar k \begin{pmatrix} 0 & e^{-i[(\alpha - \hbar\Omega)t/\hbar + \theta]} & \Delta_0 e^{-i[(\beta - \hbar\Omega)t/\hbar + \theta]} & 0 \\ e^{i[(\alpha - \hbar\Omega)t/\hbar + \theta]} & 0 & 0 & \Delta_0 e^{-i[(\beta - \hbar\Omega)t/\hbar + \theta]} \\ \Delta_0 e^{i[(\beta - \hbar\Omega)t/\hbar + \theta]} & 0 & 0 & e^{-i[(\alpha - \hbar\Omega)t/\hbar + \theta]} \\ 0 & \Delta_0 e^{i[(\beta - \hbar\Omega)t/\hbar + \theta]} & e^{i[(\alpha - \hbar\Omega)t/\hbar + \theta]} & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.1.19)$$

donde $\theta = \tan^{-1}(k_y/k_x)$. Ahora, para eliminar la parte temporal en el sistema de ecuaciones diferenciales, se expresan los coeficientes $a_m(\mathbf{k}, t)$ en términos de una transformación unitaria, esto es, $a_m(\mathbf{k}, t) = \sum_{n=1}^4 U_{mn}(t) b_n(\mathbf{k})$, con los coeficientes $b_n(\mathbf{k})$ a determinar, y donde el operador unitario $U(t)$ tiene la siguiente forma

$$U(t) = \begin{pmatrix} e^{i(2\hbar\Omega - \alpha - \beta)t/2\hbar} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i(\alpha - \beta)t/2\hbar} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i(\beta - \alpha)t/2\hbar} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i(\alpha + \beta - 2\hbar\Omega)t/2\hbar} \end{pmatrix}. \quad (4.1.20)$$

Considerando lo anterior, a partir de la Ec. (4.1.10) se recupera el siguiente problema de eigenvalores

$$\varepsilon \begin{pmatrix} b_1(\mathbf{k}) \\ b_2(\mathbf{k}) \\ b_3(\mathbf{k}) \\ b_4(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hbar\Omega - (\alpha + \beta)/2 & v_F \hbar k e^{-i\theta} & v_F \hbar k \Delta_0 e^{-i\theta} & 0 \\ v_F \hbar k e^{i\theta} & (\alpha - \beta)/2 & 0 & v_F \hbar k \Delta_0 e^{-i\theta} \\ v_F \hbar k \Delta_0 e^{i\theta} & 0 & (\beta - \alpha)/2 & v_F \hbar k e^{-i\theta} \\ 0 & v_F \hbar k \Delta_0 e^{i\theta} & v_F \hbar k e^{i\theta} & (\alpha + \beta)/2 - \hbar\Omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1(\mathbf{k}) \\ b_2(\mathbf{k}) \\ b_3(\mathbf{k}) \\ b_4(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (4.1.21)$$

Finalmente, considerando la condición de solución no trivial en la ecuación anterior, se recuperan las siguientes cuasienergías de grafeno con distorsión Kek-Y bajo radiación circularmente polarizada

$$\varepsilon_Y^{\xi,\eta}(k) = \eta \frac{1}{2} \left[\sqrt{(\alpha - \hbar\Omega)^2 + (2v_F \hbar k)^2} + \xi \sqrt{(\beta - \hbar\Omega)^2 + (2\Delta_0 v_F \hbar k)^2} \right]. \quad (4.1.22)$$

Es importante notar que aparecen dos brechas de energía de magnitud diferente en el cuasiespectro para $k = 0$, una para el cono externo ($\xi = -$),

$$\varepsilon_{Y,-}^g = \alpha - \beta = \hbar\Omega \left(\sqrt{1 + (2\tilde{E})^2} - \sqrt{1 + (2\Delta_0 \tilde{E})^2} \right), \quad (4.1.23)$$

y otra para el cono interno ($\xi = +$),

$$\varepsilon_{Y,+}^g = \varepsilon_{Y,-}^g + 2\delta\varepsilon_Y^g, \quad (4.1.24)$$

donde $\delta\varepsilon_Y^g$ es la brecha energética entre los conos concéntricos

$$\delta\varepsilon_Y^g = \beta - \hbar\Omega = \hbar\Omega \left(\sqrt{1 + (2\Delta_0 \tilde{E})^2} - 1 \right). \quad (4.1.25)$$

En la Fig. 4.1(a) se muestra el espectro de Floquet de grafeno con distorsión Kek-Y irradiado con luz circularmente polarizada, considerando una amplitud del campo eléctrico $E_0 = 9$ V/m y una frecuencia angular $\Omega = 0.5$ THz, con un parámetro de Kekulé $\Delta_0 = 0.1$. En la Fig. 4.1(b) se muestra el mismo espectro de forma esquemática, ilustrando las diferentes brechas de energía en el espectro.

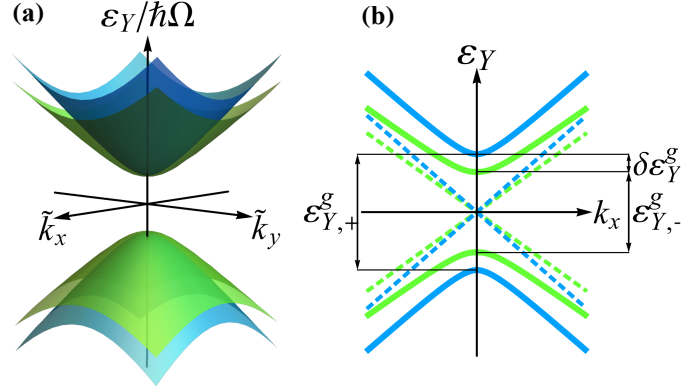


Figura 4.1: Espectro de Floquet de grafeno con textura Kek-Y bajo radiación circularmente polarizada, considerando un parámetro de Kekulé $\Delta_0 = 0.1$. (a) Cuasiespectro de energía tomando una amplitud de campo eléctrico $E_0 = 9$ V/m y una frecuencia angular $\Omega = 0.5$ THz, en donde se ha definido $\tilde{k}_i = k_i v_F / \Omega$ ($i = x, y$). (b) Esquema de las cuasienergías, en donde se aprecian las brechas de energías $\varepsilon_{Y,+}^g$ y $\varepsilon_{Y,-}^g$, correspondientes al cono interno y externo, respectivamente. Además, se aprecia la brecha de energía $\delta\varepsilon_Y^g$ entre los conos concéntricos. Las líneas punteadas corresponden al espectro de energía en ausencia de campo electromagnético externo.

Además, se encuentran los siguientes estados de Floquet para la misma textura

$$\Psi_{\xi,\eta}(\mathbf{k}, t) = e^{-i\varepsilon_Y^{\xi,\eta} t / \hbar} \begin{pmatrix} b_1^{\xi,\eta}(\mathbf{k}) \\ b_2^{\xi,\eta}(\mathbf{k}) \\ b_3^{\xi,\eta}(\mathbf{k}) \\ b_4^{\xi,\eta}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (4.1.26)$$

donde

$$b_1^{\xi,\eta}(\mathbf{k}) = \mathcal{N} e^{-i2\theta} \Delta_0 \left\{ [\varepsilon_{Y,-}^g / 2 - \varepsilon_Y^{\xi,\eta}(k)] [\varepsilon_{Y,+}^g / 2 - \varepsilon_Y^{\xi,\eta}(k)] - (\Delta_0^2 - 1)(v_F \hbar k)^2 \right\}, \quad (4.1.27)$$

$$b_2^{\xi,\eta}(\mathbf{k}) = \mathcal{N} 2e^{-i\theta} \Delta_0 v_F \hbar k \varepsilon_Y^{\xi,\eta}(k), \quad (4.1.28)$$

$$b_3^{\xi,\eta}(\mathbf{k}) = \mathcal{N} \frac{e^{-i\theta} v_F \hbar k}{\varepsilon_{Y,-}^g / 2 + \varepsilon_Y^{\xi,\eta}(k)} \left\{ [\varepsilon_{Y,-}^g / 2 - \varepsilon_Y^{\xi,\eta}(k)] [(\Delta_0^2 - 1)\varepsilon_{Y,+}^g / 2 - (\Delta_0^2 + 1)\varepsilon_Y^{\xi,\eta}(k)] - (\Delta_0^2 - 1)^2 (v_F \hbar k)^2 \right\}, \quad (4.1.29)$$

$$b_4^{\xi,\eta}(\mathbf{k}) = \mathcal{N} \left\{ [\varepsilon_Y^{\xi,\eta}(k) - \varepsilon_{Y,-}^g / 2] [\varepsilon_Y^{\xi,\eta}(k) + \varepsilon_{Y,+}^g / 2] + (\Delta_0^2 - 1)(v_F \hbar k)^2 \right\}, \quad (4.1.30)$$

con $\mathcal{N}$ una constante de normalización. Los resultados anteriores convergen con los resultados ya conocidos de grafeno prístino irradiado con luz circularmente polarizada al tomar el límite $\Delta \rightarrow 0$ [40].

Textura Kek-O

Se considera ahora grafeno con distorsión Kek-O ($\nu = 0$) bajo radiación circularmente polarizada, y se procede de manera similar al caso de grafeno con textura Kek-Y para el estudio del espectro de Floquet. Para esta textura, la ecuación diferencial en Ec. (4.1.8) toma la siguiente forma

$$i\hbar \frac{d}{dt} \varphi_m(t) = -ev_F (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}(t)) \otimes \mu_0 \varphi_m(t), \quad (4.1.31)$$

con el potencial vectorial magnético dado en Ec. (4.1.11). Nuevamente es posible hacer uso del teorema de Floquet para resolver la ecuación anterior, ya que ésta es del tipo $\dot{x}(t) = L(t)x(t)$, con $L(t)$ una función periódica del tiempo. Entonces, después de hacer los cálculos correspondientes, se encuentra que los vectores $\varphi_m(t)$ tienen la siguiente forma

$$\varphi_m(t) = \varphi_{\eta,+}(t) = \frac{e^{i\eta\alpha t/\hbar}}{\sqrt{2\alpha}} \begin{pmatrix} \eta e^{-i\Omega t/2} \sqrt{\alpha + \eta\hbar\Omega} \\ e^{i\Omega t/2} \sqrt{\alpha - \eta\hbar\Omega} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.1.32)$$

$$\varphi_m(t) = \varphi_{\eta,-}(t) = \frac{e^{i\eta\alpha t/\hbar}}{\sqrt{2\alpha}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \eta e^{-i\Omega t/2} \sqrt{\alpha + \eta\hbar\Omega} \\ e^{i\Omega t/2} \sqrt{\alpha - \eta\hbar\Omega} \end{pmatrix}, \quad (4.1.33)$$

donde nuevamente los vectores $\varphi_m(t)$ se denotan de la siguiente forma: $\varphi_1(t) = \varphi_{+,+}(t)$, $\varphi_2(t) = \varphi_{-,+}(t)$, $\varphi_3(t) = \varphi_{+,-}(t)$ y $\varphi_4(t) = \varphi_{-,-}(t)$. Dados los vectores anteriores, el siguiente paso es resolver el sistema de ecuaciones diferenciales en Ec. (4.1.10). Al igual que en el caso de grafeno con distorsión Kek-Y, se considera que los parámetros de la onda electromagnética externa satisfacen $\tilde{E} \ll 1$ (ver Ec. (4.1.18)), tal que es posible aproximar $\alpha \approx \hbar\Omega$ en las amplitudes de los vectores $\varphi_m(t)$ en Ecs. (4.1.32)-(4.1.33), manteniendo la expresión exacta en la fase de la exponencial compleja por ser un factor oscilante. Entonces, al resolver la Ec. (4.1.10) haciendo los cálculos correspondientes, se recupera el siguiente cuasiespectro de grafeno con distorsión Kek-O bajo radiación circularmente polarizada

$$\varepsilon_O^{\xi,\eta}(k) = \eta \frac{1}{2} \sqrt{(6t_0\Delta_0 + \xi\alpha - \xi\hbar\Omega)^2 + (2v_F\hbar k)^2}. \quad (4.1.34)$$

Analizando el espectro de Floquet anterior, se observa que no hay degeneración cuando se compara con el espectro de energía de grafeno con textura Kek-O en ausencia del campo electromagnético externo. El espectro de cuasienergías consiste en dos conos concéntricos con brechas de diferente magnitud en $k = 0$. Para el cono externo ($\xi = -$), la brecha energética está dada por

$$\varepsilon_{O,-}^g = 6t_0\Delta_0 - \alpha + \hbar\Omega = 6t_0\Delta_0 + \hbar\Omega \left(1 - \sqrt{1 + (2\tilde{E})^2}\right), \quad (4.1.35)$$

y para el cono interno ($\xi = +$),

$$\varepsilon_{O,+}^g = 6t_0\Delta_0 + \alpha - \hbar\Omega = 6t_0\Delta_0 - \hbar\Omega \left(1 - \sqrt{1 + (2\tilde{E})^2}\right), \quad (4.1.36)$$

con la brecha entre los conos concéntricos dada por

$$\delta\varepsilon_O^g = \alpha - \hbar\Omega. \quad (4.1.37)$$

En la Fig. 4.2(a) se muestra el cuasiespectro de energía de grafeno con distorsión Kek-O bajo luz circularmente polarizada con un parámetro de Kekulé $\Delta_0 = 0.1$, y con los parámetros del campo externo dados por $E_0 = 9$ V/m y $\Omega = 0.5$ THz. En la Fig. 4.2(b) se muestra el mismo cuasiespectro de energía de forma esquemática, ilustrando las diferentes brechas de energía. Nuevamente los resultados convergen a los resultados de grafeno prístino bajo radiación circularmente polarizada al tomar el límite $\Delta_0 \rightarrow 0$ [40].

4.1.2. Excitación con radiación linealmente polarizada

Para el caso en el que la onda electromagnética externa se encuentra linealmente polarizada, nuevamente se considera que la capa de grafeno es puramente bidimensional, tal que es posible despreciar la tercera dimensión. Entonces, el potencial vectorial magnético correspondiente a una onda linealmente polarizada toma la siguiente forma

$$\mathbf{A}(t) = \frac{E_0}{\Omega} (\cos(\Omega t), 0). \quad (4.1.38)$$

Sin pérdida de generalidad se ha tomado que el campo eléctrico oscila únicamente a lo largo del eje horizontal, esto para simplificar los cálculos. El campo eléctrico

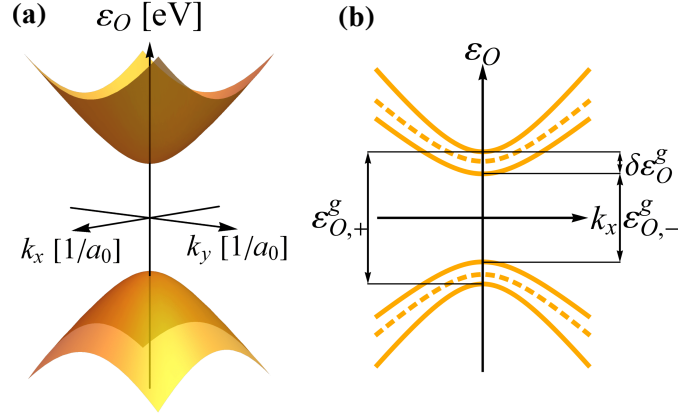


Figura 4.2: Cuasiespectro de energía de grafeno con textura Kek-O bajo radiación circularmente polarizada, considerando un parámetro de Kekulé $\Delta_0 = 0.1$. (a) Cuasiespectro de energía tomando una amplitud de campo eléctrico $E_0 = 9$ V/m y una frecuencia angular $\Omega = 0.5$ THz. (b) Esquema del espectro de Floquet, en donde se aprecian las brechas de energía $\varepsilon_{O,+}^g$ y $\varepsilon_{O,-}^g$, correspondientes al cono interno y externo, respectivamente. Además, se aprecia la brecha de energía $\delta\varepsilon_Y^g$ entre los conos concéntricos. Las líneas punteadas corresponden al espectro de energía en ausencia del campo electromagnético externo. Se observa la ausencia de degeneración en el espectro de Floquet cuando se compara con el espectro de energía sin campo externo.

correspondiente tiene la siguiente forma

$$\mathbf{E}(t) = -\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A}(t) = E_0(\sin(\Omega t), 0). \quad (4.1.39)$$

A continuación se estudia el espectro de Floquet de grafeno con distorsión Kek-Y y con distorsión Kek-O bajo radiación linealmente polarizada.

Textura Kek-Y

Para el estudio del cuasiespectro de grafeno con distorsión Kek-Y bajo radiación linealmente polarizada se considera nuevamente $\nu = 1$ en el hamiltoniano en Ec. (4.1.4) con un parámetro de Kekulé real ($\tilde{\Delta} = \Delta_0$). Dado esto, la ecuación diferencial

en Ec. (4.1.8) toma la siguiente forma

$$i\hbar \frac{d}{dt} \varphi_m(t) = -e v_F \left[(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}(t)) \otimes \mu_0 + \Delta_0 \sigma_0 \otimes (\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{A}(t)) \right] \varphi_m(t), \quad (4.1.40)$$

donde $\mathbf{A}(t)$ está dado en Ec. (4.1.38). Escribiendo explícitamente el potencial vectorial en la ecuación anterior se recupera la siguiente ecuación diferencial

$$i\hbar \frac{d}{dt} \varphi_m(t) = -\frac{e E_0 v_F}{\Omega} \cos(\Omega t) \begin{pmatrix} 0 & 1 & \Delta_0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \Delta_0 \\ \Delta_0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \Delta_0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \varphi_m(t). \quad (4.1.41)$$

Por integración se encuentra que los vectores $\varphi_m(t)$ tienen la siguiente forma

$$\varphi_m(t) = \varphi_{\xi, \eta}(t) = \frac{1}{2} e^{i\eta \tilde{E}(1+\xi \Delta_0) \sin(\Omega t)} \begin{pmatrix} \xi 1 \\ \xi \eta 1 \\ \eta 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4.1.42)$$

los cuales se denotan como sigue: $\varphi_1(t) = \varphi_{+,+}(t)$, $\varphi_2(t) = \varphi_{-,-}(t)$, $\varphi_3(t) = \varphi_{-,+}(t)$ y $\varphi_4(t) = \varphi_{+,-}(t)$. Dados los vectores anteriores, el siguiente paso es resolver el sistema de ecuaciones diferenciales en Ec. (4.1.10).

Como se comentó anteriormente, el modo de Floquet en Ec. (4.1.9) es una función periódica del tiempo con el mismo periodo que el de la onda electromagnética externa ($T = 2\pi/\Omega$), por lo que es posible escribir los coeficientes $a_j(\mathbf{k}, t)$ ($j \in \{1, 2, 3, 4\}$)

como una serie de Fourier, esto es,

$$a_j(\mathbf{k}, t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im\Omega t} f_{j,m}(\mathbf{k}), \quad (4.1.43)$$

donde $f_{j,m}(\mathbf{k})$ son los coeficientes de Fourier a determinar. Sustituyendo la expresión anterior en el sistema de ecuaciones diferenciales en Ec. (4.1.10), se recupera el siguiente sistema de ecuaciones algebraicas para los coeficientes de Fourier

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} (\varepsilon - m\hbar\Omega) e^{im\Omega t} f_{j,m}(\mathbf{k}) = \sum_{n=1}^4 \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im\Omega t} f_{n,m}(\mathbf{k}) \mathbb{H}_{jn}(t). \quad (4.1.44)$$

Ahora, es posible expandir las exponenciales complejas en los vectores en Ec. (4.1.42) utilizando la expansión de Jacobi-Anger

$$e^{\pm iz \sin(\phi)} = \sum_{s=-\infty}^{\infty} J_s(\pm z) e^{is\phi}, \quad (4.1.45)$$

donde $J_s(z)$ es la s -ésima función de Bessel de primera clase. Considerando esto, y utilizando la condición de ortogonalidad de las exponenciales complejas dependientes del tiempo,

$$\int_0^{2\pi/\Omega} dt e^{ip\Omega t} e^{-iq\Omega t} = \delta_{pq}, \quad (4.1.46)$$

el sistema de ecuaciones en Ec. (4.1.44) toma la siguiente forma

$$(\varepsilon - m\hbar\Omega) f_{j,m}(\mathbf{k}) = \sum_{n=1}^4 \left[\sum_{s=-\infty}^{\infty} (\mathcal{J}_s)_{jn} f_{n,m-s}(\mathbf{k}) + \mathcal{K}_{jn} f_{n,m}(\mathbf{k}) \right], \quad (4.1.47)$$

donde se han definido las matrices

$$\mathcal{K} = v_F \hbar k \cos(\theta) \begin{pmatrix} 1 + \Delta_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -(1 - \Delta_0) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \Delta_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -(1 + \Delta_0) \end{pmatrix}, \quad (4.1.48)$$

y

$$\mathcal{J}_s = i v_F \hbar k \sin(\theta) \begin{pmatrix} 0 & -J_s(-2\tilde{E}) & -\Delta_0 J_s(-2\Delta_0 \tilde{E}) & 0 \\ J_s(2\tilde{E}) & 0 & 0 & -\Delta_0 J_s(-2\Delta_0 \tilde{E}) \\ \Delta_0 J_s(2\Delta_0 \tilde{E}) & 0 & 0 & -J_s(-2\tilde{E}) \\ 0 & \Delta_0 J_s(2\Delta_0 \tilde{E}) & J_s(2\tilde{E}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.1.49)$$

Dado que no es posible resolver de forma analítica el sistema de ecuaciones algebraicas para los coeficientes de Fourier en Ec. (4.1.47), se considera un campo electromagnético externo de alta frecuencia, tal que $\varepsilon/\hbar\Omega \approx 0$ y $v_F k/\Omega \approx 0$. Entonces, es posible aproximar la Ec. (4.1.47) para $m \neq 0$ de la siguiente manera

$$f_{j,m}(\mathbf{k}) \approx -\frac{1}{m\hbar\Omega} \sum_{n=1}^4 \sum_{s=-\infty}^{\infty} (\mathcal{J}_s)_{jn} f_{n,m-s}(\mathbf{k}), \quad m \neq 0. \quad (4.1.50)$$

Tomando en cuenta que la condición de normalización de las funciones de onda implica que $|f_{j,m}(\mathbf{k})| \leq 1$, y que las funciones Bessel satisfacen $|J_s(z)| \leq 1$, evidentemente la única solución aceptable a la Ec. (4.1.50) es $f_{j,m \neq 0}(\mathbf{k}) \approx 0$ ($j = 1, 2, 3, 4$) [40]. Por lo tanto, es posible despreciar todos los coeficientes de Fourier $f_{j,m}(\mathbf{k})$ excepto aquellos para $m = 0$. Bajo estas consideraciones, el sistema de ecuaciones en Ec.

(4.1.47) se reduce al siguiente problema de eigenvalores para las cuasienergías ε

$$\left[\mathcal{J}_0 + \mathcal{K} - \varepsilon \mathbb{I}_{4 \times 4} \right] \otimes \begin{pmatrix} f_{1,0}(\mathbf{k}) \\ f_{2,0}(\mathbf{k}) \\ f_{3,0}(\mathbf{k}) \\ f_{4,0}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = 0, \quad (4.1.51)$$

donde $\mathbb{I}_{4 \times 4}$ es la matriz identidad de 4×4 . Considerando la condición de solución no trivial en la ecuación anterior, se recupera el siguiente cuasiespectro de energía de grafeno con distorsión Kek-Y bajo la acción de luz linealmente polarizada

$$\varepsilon_Y^{\xi,\eta}(\mathbf{k}) = \eta v_F \hbar k \left(\sqrt{\cos^2(\theta) + J_0^2(2\tilde{E}) \sin^2(\theta)} + \xi \Delta_0 \sqrt{\cos^2(\theta) + J_0^2(2\Delta_0 \tilde{E}) \sin^2(\theta)} \right), \quad (4.1.52)$$

donde se ha considerado que la función de Bessel de la primera clase de orden cero es una función par $J_0(-z) = J_0(z)$. Dada la expresión del espectro de Floquet anterior, la condición de alta frecuencia $\varepsilon/\hbar\Omega \approx 0$ y $v_F k/\Omega \approx 0$, se puede reescribir como

$$v_F \hbar k \ll \hbar\Omega, \quad (4.1.53)$$

esto es, las cuasienergías en Ec. (4.1.52) son válidas cuando la energía del fotón $\hbar\Omega$ asociado al campo electromagnético externo es mucho mayor que la energía de las cuasipartículas en grafeno prístino. Evidentemente, el cuasiespectro de energía en Ec. (4.1.52) es altamente anisotrópico como consecuencia de la interacción de los portadores de carga en el sistema con el campo externo, lo cual introduce funciones de Bessel en la relación de dispersión. A diferencia del caso de incidencia de luz circularmente polarizada, para este caso las cuasienergías permanecen sin brecha. Además, al tomar el límite $\Delta_0 \rightarrow 0$, se recupera el espectro de Floquet de grafeno

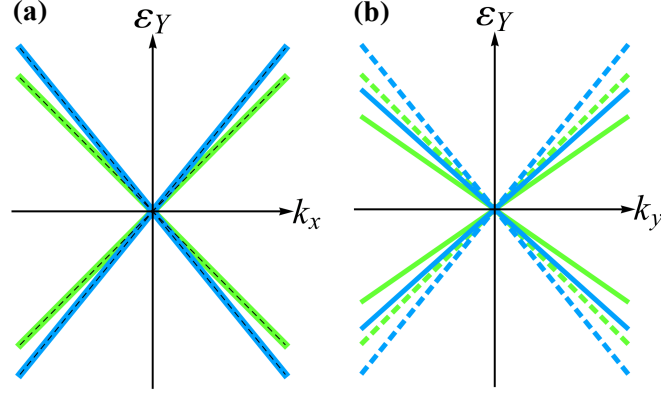


Figura 4.3: Esquemas del espectro de Floquet de grafeno con distorsión Kek-Y bajo radiación linealmente polarizada, donde las líneas punteadas indican el espectro en ausencia de campo externo. (a) Cuasiespectro de energía tomando $k_y = 0$, en donde se observa como el espectro permanece invariante ante la incidencia de radiación. (b) Cuasienergías tomando $k_x = 0$, en donde se aprecia el cambio en la pendiente de los conos inducido por la interacción electrón-fotón.

prístino bajo radiación linealmente polarizada [40]. En la Fig. 4.3(a) se muestra el espectro de Floquet de grafeno con distorsión Kek-Y bajo luz linealmente polarizada tomando $k_y = 0$, el cual corresponde al espectro de energía de las cuasipartículas moviéndose a lo largo de la dirección de oscilación del campo eléctrico de la onda externa, ilustrando como el cuasiespectro coincide con el espectro antes de introducir el campo externo. En la Fig. 4.3(b) se observa el mismo espectro de Floquet pero ahora tomando $k_x = 0$, correspondiendo al cuasiespectro de energía de los portadores de carga moviéndose perpendicular a la dirección de oscilación del campo eléctrico externo, apreciándose como la incidencia de radiación vuelve anisotrópico el espectro.

Textura Kek-O

Para el estudio del espectro de Floquet de grafeno con distorsión Kek-O ($\nu = 0$) bajo la acción de una onda electromagnética linealmente polarizada se procede de forma similar al caso de grafeno con textura Kek-Y. Para la textura Kek-Y, la

ecuación diferencial en Ec. (4.1.8) toma la siguiente forma

$$i\hbar \frac{d}{dt} \varphi_m(t) = -ev_F (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}(t)) \otimes \mu_0 \varphi_m(t), \quad (4.1.54)$$

donde el potencial vectorial magnético $\mathbf{A}(t)$ está dado en Ec. (4.1.38). Sustituyendo explícitamente la expresión del potencial vectorial se recupera la siguiente ecuación diferencial

$$i\hbar \frac{d}{dt} \varphi_m(t) = -\frac{eE_0v_F}{\Omega} \cos(\Omega t) \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \varphi_m(t). \quad (4.1.55)$$

Por integración se obtienen las siguientes soluciones a la ecuación anterior

$$\varphi_m(t) = \varphi_{\eta,+}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\eta \tilde{E} \sin(\Omega t)} \begin{pmatrix} \eta 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_m(t) = \varphi_{\eta,-}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\eta \tilde{E} \sin(\Omega t)} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \eta 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4.1.56)$$

donde nuevamente los vectores $\varphi_m(t)$ se denotan de la siguiente forma: $\varphi_1(t) = \varphi_{+,+}(t)$, $\varphi_2(t) = \varphi_{-,+}(t)$, $\varphi_3(t) = \varphi_{+,-}(t)$ y $\varphi_4(t) = \varphi_{-,-}(t)$. Ahora, para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales en Ec. (4.1.10), se sigue el mismo procedimiento utilizado anteriormente para grafeno con distorsión Kek-Y bajo luz linealmente polarizada, tomando nuevamente la aproximación de alta frecuencia en Ec. (4.1.53). Haciendo los cálculos correspondientes, se encuentra el siguiente espectro de Floquet de grafeno con distorsión Kek-O irradiado con luz linealmente polarizada

$$\varepsilon_O^\eta(\mathbf{k}) = \eta \sqrt{(v_F \hbar k)^2 [\cos^2(\theta) + J_0^2(2\tilde{E}) \sin^2(\theta)] + (3t_0 \Delta_0)^2 J_0^2(2\tilde{E})}.$$

Se observa nuevamente que el cuasiespectro de energía es altamente anisotrópico al considerar luz linealmente polarizada. Además, al comparar el cuasiespectro anterior con el correspondiente espectro en ausencia de campo externo (ver Ec. (2.2.8)), la brecha energética en $k = 0$ se ve reducida, tal que ahora tiene la siguiente magnitud

$$\varepsilon_O^g = 6t_0\Delta_0|J_0(2\tilde{E})|, \quad (4.1.57)$$

observando cómo en ausencia de campo externo ($\tilde{E} \rightarrow 0$ y $J_0(2\tilde{E}) \rightarrow 1$) se recupera la brecha de energía de magnitud $6t_0\Delta_0$ en grafeno con distorsión Kek-O. En general, la incidencia de radiación linealmente polarizada sobre grafeno con textura Kek-Y es equivalente a hacer la transformación $k_y \rightarrow |J_0(2\tilde{E})|k_y$ (cuando el campo eléctrico oscila a lo largo del eje horizontal) en la relación de dispersión en Ec. (2.2.8), y reducir la brecha de energía en $k = 0$ por un factor $|J_0(2\tilde{E})|$, de acuerdo a la Ec. (4.1.57). En la Fig. 4.4(a) se observa el espectro de Floquet en Ec. (4.1.57) tomando $k_y = 0$, y en la Fig. 4.4(b) tomando $k_x = 0$, ilustrando cómo la incidencia de luz linealmente polarizada vuelve anisotrópico el cuasiespectro de energía y reduce la brecha energética en comparación con el caso en ausencia de radiación.

Otro aspecto importante que se observa en la relación de dispersión en Ec. (4.1.57), es que para $J_0(2\tilde{E}) = 0$ el espectro de Floquet se mantiene sin brecha, esto es,

$$\varepsilon_O^\eta(\mathbf{k}) = \eta v_F \hbar k \cos(\theta) = \eta v_F \hbar k_x, \quad \text{si } J_0(2\tilde{E}) = 0. \quad (4.1.58)$$

El cuasiespectro de energía anterior presenta bandas no dispersivas cuando $\theta = \pm\pi/2$, lo que significa que los portadores de carga se localizan en dirección perpendicular a la oscilación del campo eléctrico externo.

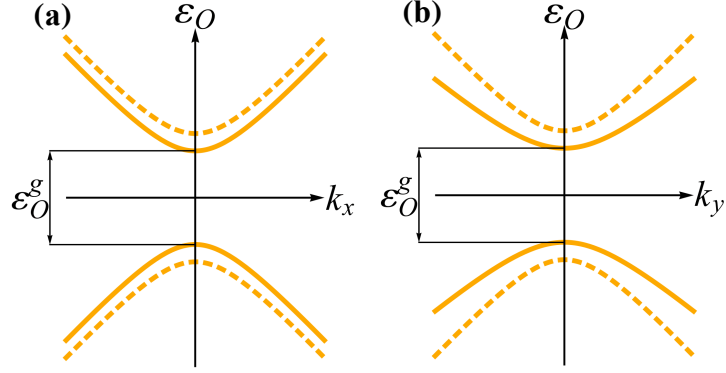


Figura 4.4: Esquema del cuasiespectro de energía de grafeno con distorsión Kek-O bajo la acción de luz linealmente polarizada, tomando (a) $k_y = 0$, y (b) $k_x = 0$. Las líneas punteadas corresponden al espectro de energía en ausencia de radiación, apreciándose la anisotropía de los conos y como la brecha de energía en $k = 0$ se reduce como consecuencia del campo externo.

4.2. Conductividad DC

Para estudiar más a profundidad las propiedades de transporte de grafeno con distorsión Kekulé bajo radiación electromagnética, se procede a calcular la conductividad estática de grafeno con textura Kek-Y bajo la acción de luz circularmente polarizada dentro del enfoque de la teoría de transporte de Boltzmann desarrollada en la Sección 3.3. Como se comentó anteriormente, la dispersión por impurezas presentes en la muestra es el mecanismo que contribuye a la conductividad eléctrica dentro de esta teoría. Entonces, se consideran funciones delta de Dirac como dispersores distribuidos aleatoriamente, tal que el potencial de dispersión toma la siguiente forma [95]

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N U_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j). \quad (4.2.1)$$

Algo importante de señalar es que las transiciones horizontales entre valles (intervallo) se pueden llevar a cabo en grafeno con distorsión Kekulé, ya que como se discutió anteriormente, los conos de Dirac son traídos al centro de la zona de Brillouin, que-

dando separados por un momento más pequeño. Entonces, tanto transiciones intra-
valle (transiciones horizontales dentro del mismo valle) como intervalle contribuyen
a la conductividad eléctrica. Considerando el cuasiespectro de energía de grafeno con
distorsión Kek-Y bajo radiación circularmente polarizada $\varepsilon_Y^{\xi,\eta}(k)$ en Ec. (4.1.22), y
una energía de Fermi positiva ($\varepsilon_F > 0$), la probabilidad de transición horizontal por
unidad de tiempo de un portador de carga de conducción ($\eta = +$) de un estado
inicial $\mathbf{k}$ en el cono ξ , a un estado final $\mathbf{k}'$ en el cono ξ' , se calcula utilizando la
aproximación de Born, la cual toma la siguiente forma [40, 96]

$$w_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{\xi',\xi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\chi_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{\xi',\xi}|^2 |U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}|^2 \delta(\varepsilon_Y^{\xi',+}(k') - \varepsilon_Y^{\xi,+}(k)), \quad (4.2.2)$$

donde

$$\chi_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{\xi',\xi} = \sum_{n=1}^4 b_n^{\xi,+}(\mathbf{k}) [b_n^{\xi',+}(\mathbf{k}')]^*, \quad (4.2.3)$$

con cada $b_n^{\xi,+}(\mathbf{k})$ en Ecs. (4.1.27)-(4.1.30), y el módulo cuadrado del potencial de
dispersión dado por

$$|U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}|^2 = \left| \frac{1}{A} \int_A d^2r e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) \right|^2 = \frac{N_A}{A} U_0^2, \quad (4.2.4)$$

donde A es el área de la muestra y $N_A = N/A$ la densidad de impurezas. Al aplicar
un campo eléctrico estacionario $\mathbf{E}$ a lo largo del plano de la muestra, se induce una
densidad de corriente $\mathbf{J}$. De acuerdo a la Ec. (3.3.17), la ecuación de Boltzmann para
la densidad de corriente eléctrica a temperatura cero está dada por

$$\mathbf{J} = g_s \sum_{\xi} e^2 \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \mathbf{v}_{\xi}(k) \tau_{\xi}(k) (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{\xi}(k)) \delta(\varepsilon_Y^{\xi,+}(k) - \varepsilon_F), \quad (4.2.5)$$

donde se ha introducido el factor $g_s = 2$ debido al grado de libertad de espín, $\mathbf{v}_\xi(k) = (v_{\xi,x}(k), v_{\xi,y}(k)) = (1/\hbar)\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon_Y^{\xi,+}(k)$ es la velocidad de grupo, y $\tau_\xi(k)$ el tiempo de relajación, el cual se recupera a partir de la siguiente expresión (ver Eq. (3.3.21))

$$\frac{1}{\tau_\xi(k)} = \sum_{\xi'} A \int d^2k' \left[1 - \frac{\tau_{\xi'}(k') (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{\xi'}(k'))}{\tau_\xi(k) (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_\xi(k))} \right] w_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{\xi',\xi}. \quad (4.2.6)$$

La suma en la Ec. (4.2.5) corre sobre los estados iniciales, y la suma en la Ec. (4.2.6) sobre los finales. Dado que el sistema es homogéneo e isotrópico, la corriente fluye en la misma dirección que el campo eléctrico. Entonces, sin pérdida de generalidad, se aplica un campo eléctrico a lo largo del eje horizontal, esto es, $\mathbf{E} = (E_x, 0)$, tal que la conductividad σ , de acuerdo a la ley de Ohm, queda determinada por $\sigma = J_x/E_x$.

Para evaluar la integral en Ec. (4.2.5), se escribe la función δ como función de k de la siguiente manera

$$\delta(\varepsilon_Y^{\xi,+}(k) - \varepsilon_F) = \frac{\delta(k - k_F^\xi)}{|\partial_k \varepsilon_Y^{\xi,+}(k)|}, \quad (4.2.7)$$

donde k_F^ξ es el módulo del vector de onda de Fermi, tal que $\varepsilon_Y^{\xi,+}(k_F^\xi) = \varepsilon_F$. Resulta conveniente escribir el módulo de la deriva en k de la energía en la ecuación anterior en función de la velocidad de grupo, esto es,

$$\delta(\varepsilon_Y^{\xi,+}(k) - \varepsilon_F) = \frac{\delta(k - k_F^\xi)}{\hbar v_\xi(k)}, \quad (4.2.8)$$

donde $v_\xi(k) = |\partial_k \varepsilon_Y^{\xi,+}(k)| = |\mathbf{v}_\xi(k)|$. Sustituyendo la expresión anterior en la Ec.

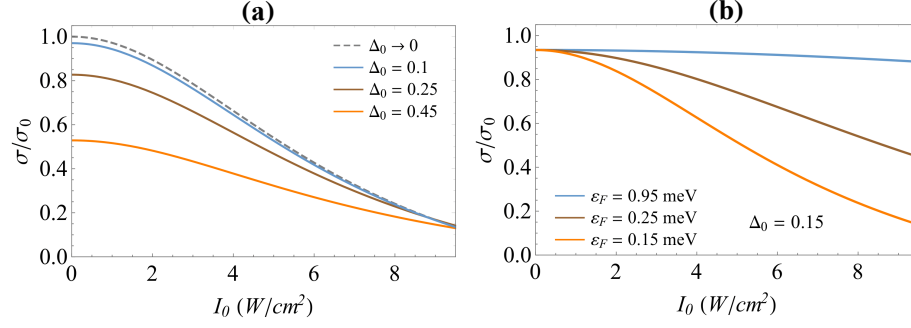


Figura 4.5: Conductividad eléctrica (en unidades de $\sigma_0 = 4\hbar e^2 v_F^2 / \pi N_A U_0^2$) de grafeno con distorsión Kek-Y bajo radiación circularmente polarizada en función de la irradiancia del campo externo $I_0 = \epsilon_0 E_0^2 c / 2$, donde ϵ_0 es la permitividad eléctrica en el vacío. (a) Conductividad a una energía de Fermi $\varepsilon_F = 0.15$ meV y varios valores del parámetro de Kekulé Δ_0 . La curva gris punteada corresponde al caso límite de grafeno $\Delta_0 \rightarrow 0$. (b) Conductividad considerando $\Delta_0 = 0.15$ y varios valores de la energía de Fermi.

(4.2.5), la componente J_x de la densidad de corriente eléctrica está dada por

$$\begin{aligned}
 J_x &= g_s \sum_{\xi} e^2 \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} v_{\xi,x}(k) \tau_{\xi}(k) (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{\xi}(k)) \frac{\delta(k - k_F^{\xi})}{\hbar v_{\xi}(k)}, \\
 &= g_s \sum_{\xi} \frac{e^2 E_x}{(2\pi)^2 \hbar} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} dk k \tau_{\xi}(k) v_{\xi}^2(k) \cos^2 \theta \frac{\delta(k - k_F^{\xi})}{v_{\xi}(k)}, \\
 &= g_s \sum_{\xi} \frac{e^2 E_x}{4\pi \hbar} k_F^{\xi} \tau_{\xi}(k_F^{\xi}) v_{\xi}(k_F^{\xi}).
 \end{aligned} \tag{4.2.9}$$

Finalmente, la conductividad eléctrica de grafeno con distorsión Kek-Y bajo radiación circularmente toma la siguiente forma

$$\sigma(\varepsilon_F) = \sum_{\xi} \frac{e^2}{2\pi \hbar} k_F^{\xi} \tau_{\xi}(k_F^{\xi}) v_{\xi}(k_F^{\xi}). \tag{4.2.10}$$

Al resolver la ecuación integral en Ec. (4.2.6), se recupera una expresión para el tiempo de relajación $\tau_{\xi}(k_F^{\xi})$ [97], la cual se ha omitido por brevedad. En la Fig. 4.5(a) se muestra la conductividad eléctrica en función de la irradiancia del campo

externo $I_0 = \epsilon_0 E_0^2 c / 2$, con ϵ_0 la permitividad eléctrica en el vacío, para una energía de Fermi $\varepsilon_F = 0.15$ meV y varios valores de Δ_0 , incluyendo el caso límite $\Delta_0 \rightarrow 0$, recuperando la conductividad eléctrica de grafeno prístino irradiado con luz circularmente polarizada [40]. En la Fig. 4.5(b) se muestra la conductividad eléctrica para $\Delta_0 = 0.15$ y varios valores de la energía de Fermi. En todos los casos se observa que la conductividad eléctrica decrece en función de la irradiancia, ya que la magnitud de las brechas energéticas en Ecs. (4.1.23)-(4.1.24) son funciones crecientes de la irradiancia, esto es, al aumentar la irradiancia el sistema se vuelve más aislante.

Capítulo 5

Propiedades ópticas de sistemas de Dirac anisotrópicos e inclinados

5.1. Hamiltoniano a bajas energías

Para comenzar con el estudio de las propiedades ópticas de sistemas bidimensionales masivos con conos de Dirac anisotrópicos e inclinados, se considera el siguiente hamiltoniano a bajas energías en el espacio de momentos [98]

$$H^\xi(\mathbf{k}) = \xi(\hbar v_t k_y \mathbb{I} + \hbar v_x k_x \sigma_x + \xi \hbar v_y k_y \sigma_y) + \Delta^\xi \sigma_z , \quad (5.1.1)$$

donde $\mathbb{I}$ es la matriz identidad de 2×2 , y nuevamente σ_i son las matrices de Pauli actuando sobre el grado de libertad de pseudospín. Como se discutió en la Sección 2.3, el espectro energético de esta clase de sistemas es anisotrópico cuando $v_x \neq v_y$. Además, una velocidad v_t finita da lugar al rompimiento de la simetría electrón-hueco, tal que $\sigma_z H^\xi(\mathbf{k}) \sigma_z \neq -H^\xi(\mathbf{k})$ (ver Sección 2.4). En el hamiltoniano anterior

se ha introducido el término dependiente del valle $\Delta^\xi \sigma_z$, el cual abre una brecha de energía en el punto de Dirac de magnitud $|2\Delta^\xi|$. Es posible manipular tal brecha energética de forma independiente en cada valle, ya sea por una textura de espín en la estructura cristalina del sistema [63], o por la combinación de incidencia de luz circularmente polarizada y energías de sitio diferentes en las subredes [98]. Lo anterior permite tener un control sobre las simetrías del sistema, tal que términos de masa diferentes, $\Delta^+ \neq \Delta^-$, da lugar al rompimiento de la simetría de inversión temporal. Además, la simetría de inversión espacial deja de preservarse si $\Delta^+ \neq -\Delta^-$ (ver Sección 2.4). Para $\Delta^\xi = 0$, la simetría de inversión temporal y la simetría de inversión espacial se preservan simultáneamente, y el hamiltoniano en Ec. (5.1.1) se reduce al hamiltoniano en Ec. (2.3.1), el cual describe las excitaciones a bajas energías de sistemas de Dirac con conos inclinados y anisotrópicos, tal como borofeno 8-*Pmmn*, el semiconductor orgánico α -(BEDT-TTF)₂I₃, y dicalcogenuros de metales de transición. Además, al tomar $v_x = v_y = v_F$ y $v_t = 0$ se recupera el hamiltoniano que describe a los fermiones de Dirac sin masa en grafeno, mientras que el hamiltoniano de borofeno 8-*Pmmn* se recupera al tomar $v_x = 0.86 v_F$, $v_y = 0.69 v_F$ y $v_t = 0.32 v_F$.

El espectro de energía correspondiente al hamiltoniano en Ec. (5.1.1) tiene la siguiente forma

$$\varepsilon_\lambda^\xi(k_x, k_y) = \xi \alpha_t k_y + \lambda \sqrt{\alpha_x^2 k_x^2 + \alpha_y^2 k_y^2 + (\Delta^\xi)^2}, \quad (5.1.2)$$

donde $\alpha_i = \hbar v_i$ ($i = x, y, t, F$), y $\lambda = \pm$ denota la banda de conducción y de valencia, respectivamente. En la Fig. 5.1(a) se muestran las bandas de energía considerando brechas energéticas diferentes en cada punto de Dirac. Además, se encuentra que los

espinores asociados a las cuasipartículas en esta clase de sistemas están dados por

$$\psi_{\lambda}^{\xi}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2d^{\xi}(\mathbf{k})}} \begin{pmatrix} e^{-i\xi\phi_{\mathbf{k}}/2} \sqrt{d^{\xi}(\mathbf{k}) + \lambda\Delta^{\xi}} \\ \lambda e^{i\xi\phi_{\mathbf{k}}/2} \sqrt{d^{\xi}(\mathbf{k}) - \lambda\Delta^{\xi}} \end{pmatrix}, \quad (5.1.3)$$

donde $2d^{\xi}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{+}^{\xi}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{-}^{\xi}(\mathbf{k})$ y $\phi_{\mathbf{k}} = \tan^{-1}(v_y k_y / v_x k_x)$. Algo importante de notar en la relación de dispersión en Ec. (5.1.2) es que la cantidad $\min\{\varepsilon_{+}^{\xi}(\mathbf{k})\} - \max\{\varepsilon_{-}^{\xi}(\mathbf{k})\} = 2|\Delta^{\xi}|\sqrt{1 - \gamma^2}$ es menor que la energía vertical más pequeña $\min\{\varepsilon_{+}^{\xi}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{-}^{\xi}(\mathbf{k})\} = \varepsilon_{+}^{\xi}(\mathbf{0}) - \varepsilon_{-}^{\xi}(\mathbf{0}) = 2|\Delta^{\xi}|$, lo cual implica que la presencia simultánea de la masa (Δ^{ξ}) y la inclinación de los conos (determinada por la velocidad v_t) da lugar a una brecha de energía indirecta de magnitud $|2\tilde{\Delta}^{\xi}|$, donde

$$\tilde{\Delta}^{\xi} = \Delta^{\xi} \sqrt{1 - \gamma^2}, \quad (5.1.4)$$

con $\gamma = v_t/v_y$ ($0 \leq \gamma < 1$) el parámetro que determina la inclinación. Dado lo anterior, se deducen tres escenarios diferentes para la posición del nivel de Fermi en cada valle:

- (I) $|\varepsilon_F| > |\Delta^{\xi}|$, energía de Fermi arriba de la brecha de energía
- (II) $|\tilde{\Delta}^{\xi}| < |\varepsilon_F| < |\Delta^{\xi}|$, energía de Fermi en la zona indirecta
- (III) $|\varepsilon_F| < |\tilde{\Delta}^{\xi}|$, energía de Fermi en la brecha de energía

Para cada uno de los escenarios anteriores, la respuesta óptica del sistema tiene un comportamiento diferente, como se discute a continuación.

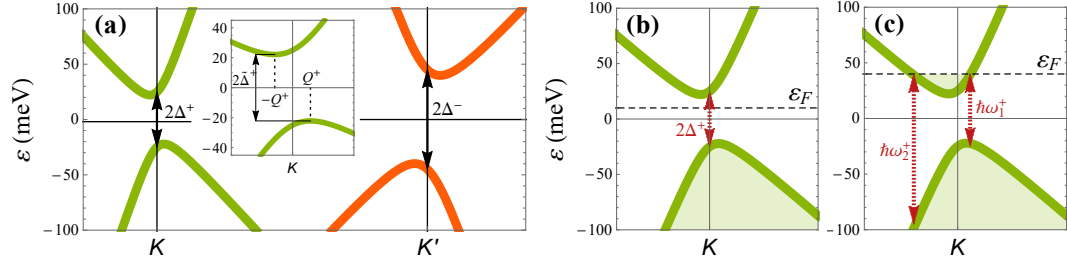


Figura 5.1: (a) Espectro de energía $\varepsilon_\lambda^\xi(0, k_y)$ de un sistema de Dirac con conos inclinados y anisotrópicos en ausencia de simetría de valle, considerando $\Delta^+ = 25$ meV y $\Delta^- = 45$ meV. La naturaleza indirecta de la brecha de energía se ilustra en la gráfica insertada, mostrando también los puntos críticos $(0, \mp Q^+)$ de las bandas. (b) Energía de Fermi en la brecha energética, $|\varepsilon_F| < |\tilde{\Delta}^+|$, donde se ilustra la energía mínima $2|\Delta^+|$ para transiciones verticales. (c) Nivel de Fermi por arriba de la brecha de energía, $|\varepsilon_F| > |\Delta^+|$, donde las energías $\hbar\omega_1^+$ y $\hbar\omega_2^+$ dan las energías mínimas y máximas necesarias para transiciones interbanda, respectivamente.

Contornos de Fermi

Los contornos de Fermi a una energía de Fermi fija ε_F están definidos por $C_\lambda^\xi = \{\mathbf{k} | \varepsilon_\lambda^\xi(\mathbf{k}) = \varepsilon_F\}$. De acuerdo a la relación de dispersión en Ec. (5.1.2), los contornos de Fermi son elipses centradas en $(0, -\xi\lambda Q^\xi |\varepsilon_F| / |\tilde{\Delta}^\xi|)$, con $Q^\xi = (|\Delta^\xi| / \alpha_y)(\gamma / \sqrt{1 - \gamma^2})$, definidas por la siguiente ecuación

$$(1 - \gamma^2)\alpha_x^2(k_{\lambda,x}^\xi)^2 + (1 - \gamma^2)^2\alpha_y^2\left(k_{\lambda,y}^\xi + \xi\lambda Q^\xi \frac{|\varepsilon_F|}{|\tilde{\Delta}^\xi|}\right)^2 = \varepsilon_F^2 - (\tilde{\Delta}^\xi)^2, \quad (5.1.5)$$

(ver Fig. 5.2). Se observa que cuando el nivel de Fermi se encuentra en la zona indirecta, $|\tilde{\Delta}^\xi| < |\varepsilon_F| < |\Delta^\xi|$, la elipse se desplaza completamente a la región $k_y < 0$ ($k_y > 0$) para $\xi\lambda = +$ ($\xi\lambda = -$), lo cual modifica significativamente el espacio de momentos disponible para transiciones interbanda con respecto al caso $|\varepsilon_F| > |\Delta^\xi|$, tal como se ilustra en las Figs. 5.2(b)-(d). Además, las raíces de la ecuación $\varepsilon_\lambda^\xi(\mathbf{k}) = \varepsilon_F$ definen los vectores de onda de Fermi, tal que para $|\varepsilon_F| > |\Delta^\xi|$ la ecuación

$\varepsilon_\lambda^\xi(k, \theta) = \varepsilon_F$ da lugar a las siguientes curvas paramétricas

$$k_{\lambda,F}^\xi(\theta) = \frac{1}{\alpha_F} \frac{\sqrt{\varepsilon_F^2 g^2(\theta) - (\Delta^\xi)^2 [g^2(\theta) - h^2(\theta)]} - \xi \lambda |\varepsilon_F| h(\theta)}{g^2(\theta) - h^2(\theta)}, \quad \theta \in [0, 2\pi], \quad (5.1.6)$$

y para $|\tilde{\Delta}^\xi| < |\varepsilon_F| < |\Delta^\xi|$,

$$q_{\lambda,F}^{\xi,\pm}(\theta) = \frac{1}{\alpha_F} \frac{\xi \lambda |\varepsilon_F| (-h(\theta)) \pm \sqrt{\varepsilon_F^2 g^2(\theta) - (\Delta^\xi)^2 [g^2(\theta) - h^2(\theta)]}}{g^2(\theta) - h^2(\theta)}, \quad |\theta - \theta_0| \leq \theta_\xi^*, \quad (5.1.7)$$

donde $\theta_0 = 3\pi/2$ ($\theta_0 = \pi/2$) si $\xi\lambda = +$ ($\xi\lambda = -$), con $h(\theta) = (\alpha_t/\alpha_F)\sin(\theta)$ caracterizando la inclinación del espectro, y $g^2(\theta) = (\alpha_x^2/\alpha_F^2)\cos^2(\theta) + (\alpha_y^2/\alpha_F^2)\sin^2(\theta)$ la anisotropía. Además, el ángulo θ_ξ^* está definido como

$$\tan \theta_\xi^* = \frac{v_y}{v_x} \sqrt{\frac{\varepsilon_F^2 - (\tilde{\Delta}^\xi)^2}{(\Delta^\xi)^2 - \varepsilon_F^2}}. \quad (5.1.8)$$

Los signos $\pm$ en Ec. (5.1.7) definen los arcos $q_{\lambda,F}^{\xi,+}(\theta)$ y $q_{\lambda,F}^{\xi,-}(\theta)$, los cuales forman la elipse de Fermi que cae completamente en el semiplano $k_y < 0$ o $k_y > 0$, tal que $q_{\lambda,F}^{\xi,+}(\theta_\xi^*) = q_{\lambda,F}^{\xi,-}(\theta_\xi^*)$ (ver Fig. 5.2(d)).

5.2. Transiciones ópticas: densidad conjunta de estados

Para el estudio del tensor de conductividad óptica, resulta conveniente estudiar antes la densidad conjunta de estados, la cual da información acerca de las propiedades espectrales del sistema que de igual forma se manifiestan en la conductividad óptica. La densidad conjunta de estados da el número de transiciones verticales po-

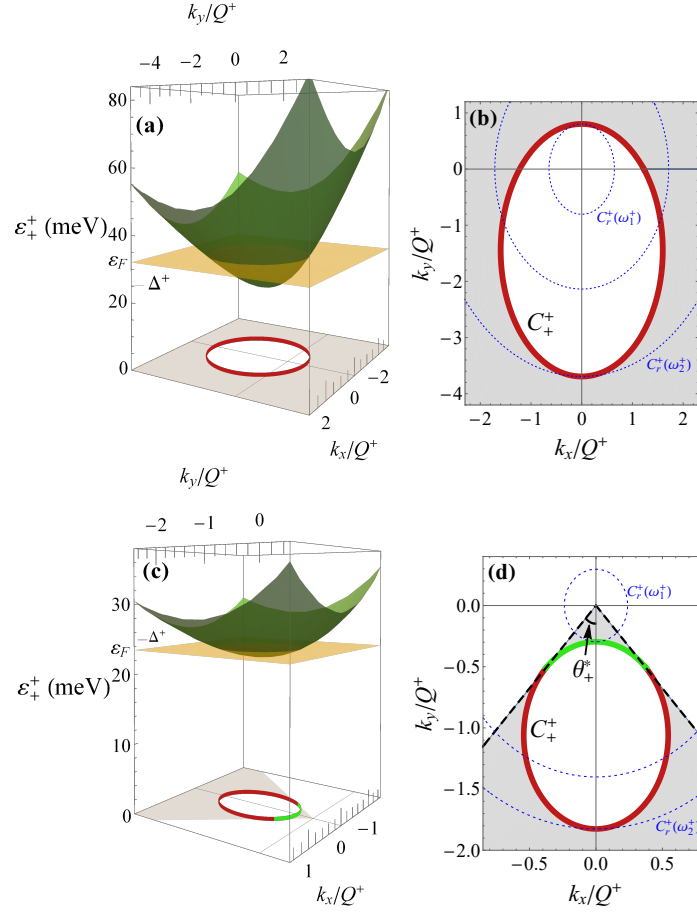


Figura 5.2: Banda de conducción $\varepsilon_+^+(\mathbf{k})$ en la vecindad del punto K , considerando $\Delta^+ = 25$ meV. (a) Energía de Fermi arriba de la zona indirecta $|\varepsilon_F| > |\Delta^+|$. (b) Contorno de Fermi $C_+^+ = \{\mathbf{k} | \varepsilon_+^+(\mathbf{k}) = \varepsilon_F\}$ ilustrado en (a), donde la región gris representa al espacio de momentos disponible para transiciones interbanda (verticales). (c) Nivel de Fermi en la zona indirecta $|\tilde{\Delta}^+| < |\varepsilon_F| < |\Delta^+|$. (d) Contorno de Fermi ilustrado en (c), donde la curva verde corresponde al arco $q_{+,F}^{+,-}(\theta)$, y la curva roja al arco $q_{+,F}^{+,+}(\theta)$, en el espacio $k_y < 0$ dentro del sector $|\theta - 3\pi/2| < \theta_+^*$. Se observa como el espacio de momentos disponible para transiciones interbanda (región gris) es drásticamente reducido en comparación con el caso ilustrado en (b). En (b) y (d) también se muestran curvas de resonancia $C_r^+(\omega) = \{\mathbf{k} | 2d^+(\mathbf{k}) = \hbar\omega\}$ (curvas azules punteadas), las cuales son elipses centradas en el origen definidas para $\hbar\omega > 2\Delta^+$. Solamente los arcos de $C_r^+(\omega)$ que caen dentro de la zona sombreada gris contribuyen a la respuesta óptica.

sibles entre $\varepsilon_+^\xi(\mathbf{k})$ y $\varepsilon_-^\xi(\mathbf{k})$ separadas por una energía $\hbar\omega$, y está definida como

$$\mathcal{J}^{(\xi)}(\omega) = g_s \int' \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \delta(\varepsilon_+^\xi(\mathbf{k}) - \varepsilon_-^\xi(\mathbf{k}) - \hbar\omega), \quad (5.2.1)$$

tal que la densidad conjunta de estados total $\mathcal{J}(\omega)$ es la suma de las contribuciones en la vecindad de cada punto de Dirac, esto es, $\mathcal{J}(\omega) = \sum_{\xi=\pm} \mathcal{J}^{(\xi)}(\omega)$. El factor $g_s = 2$ en la Ec. (5.2.1) se introduce por la degeneración de espín, y la prima en la integral indica la región en el espacio $\mathbf{k}$ para la cual se cumple $\varepsilon_-^\xi(\mathbf{k}) < \varepsilon_F < \varepsilon_+^\xi(\mathbf{k})$, como resultado del bloqueo de Pauli. Esta desigualdad delimita la región disponible en el espacio de momentos para transiciones verticales. Por otro lado, la función delta de Dirac en el integrando restringe la integral a aquellos puntos en el espacio $\mathbf{k}$ que caen sobre las curvas de resonancia definidas por $\mathcal{C}_r^\xi(\omega) = \{(k_x, k_y) | 2d^\xi(k_x, k_y) = \hbar\omega\}$. En las Figs. 5.2(b)-(d) se muestran algunas de estas curvas en azul.

Por otro lado, la diferencia de energía $2d^\xi(k, \theta)$ entre la banda de conducción y de valencia en las curvas de Fermi $k_{\lambda,F}^\xi(\theta)$ y $q_{\lambda,F}^{\xi,\pm}(\theta)$ está dada por

$$\hbar\omega_\lambda^\xi(\theta) = 2 \frac{|\varepsilon_F|g^2(\theta) - \xi\lambda h(\theta)\sqrt{\varepsilon_F^2 g^2(\theta) - (\Delta^\xi)^2[g^2(\theta) - h^2(\theta)]}}{g^2(\theta) - h^2(\theta)}, \quad (5.2.2)$$

y

$$\hbar\nu_\lambda^{\xi,\pm}(\theta) = 2 \frac{|\varepsilon_F|g^2(\theta) \pm \xi\lambda(-h(\theta))\sqrt{\varepsilon_F^2 g^2(\theta) - (\Delta^\xi)^2[g^2(\theta) - h^2(\theta)]}}{g^2(\theta) - h^2(\theta)}, \quad (5.2.3)$$

respectivamente. Las expresiones anteriores se reducen al valor $2|\varepsilon_F|$ cuando $\gamma = 0$, el cual es el resultado esperado para un sistema con conos de Dirac sin inclinación. Además, los valores mínimos y máximos de $\hbar\omega_\lambda^\xi(\theta)$ y $\hbar\nu_\lambda^{\xi,\pm}(\theta)$ ocurren en $\theta = \pi/2$ y $\theta = 3\pi/2$, los cuales toman las siguientes expresiones

$$\hbar\omega_1^\xi(\varepsilon_F) = \frac{2}{1-\gamma^2} \left(|\varepsilon_F| - \gamma\sqrt{\varepsilon_F^2 - (\tilde{\Delta}^\xi)^2} \right), \quad (5.2.4)$$

$$\hbar\omega_2^\xi(\varepsilon_F) = \frac{2}{1-\gamma^2} \left(|\varepsilon_F| + \gamma\sqrt{\varepsilon_F^2 - (\tilde{\Delta}^\xi)^2} \right), \quad (5.2.5)$$

tal que $\min_{\theta}\{\hbar\omega_{\pm}^{\xi}(\theta)\} = \min_{\theta}\{\hbar\nu_{\pm}^{\xi,-}(\theta)\} = \hbar\omega_1^{\xi} < 2|\varepsilon_F|$, y $\max_{\theta}\{\hbar\omega_{\pm}^{\xi}(\theta)\} = \max_{\theta}\{\hbar\nu_{\pm}^{\xi,+}(\theta)\} = \hbar\omega_2^{\xi} > 2|\varepsilon_F|$ (ver Figs. 5.1(b)-(c)). Nuevamente $\hbar\omega_1^{\xi}(\varepsilon_F)$ y $\hbar\omega_2^{\xi}(\varepsilon_F)$ se reducen a $2|\varepsilon_F|$ cuando se preserva la simetría electrón-hueco ($\gamma = 0$).

Continuando con el cálculo de la densidad conjunta de estados, la integral en Ec. (5.2.1) en coordenadas polares toma la siguiente forma para el escenario $|\varepsilon_F| > |\Delta^{\xi}|$,

$$\mathcal{J}^{(\xi)}(\omega) = \frac{g_s}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_{k_{\lambda,F}^{\xi}(\theta)}^{\infty} dk k \delta(2d^{\xi}(k, \theta) - \hbar\omega). \quad (5.2.6)$$

La función δ en la ecuación anterior se puede escribir como función de k de la siguiente forma

$$\delta(2d^{\xi}(k, \theta) - \hbar\omega) = \Theta[\omega - \omega_{\lambda}^{\xi}(\theta)] \frac{\delta(k - k_r(\theta))}{|\partial_k 2d^{\xi}(k, \theta)|}, \quad (5.2.7)$$

donde $k_r(\theta)$ es la raíz de la ecuación $2d^{\xi}(k, \theta) = \hbar\omega$. La función escalón en la ecuación anterior proviene de la condición $k > k_{\lambda,F}^{\xi}(\theta)$, lo cual implica que $\hbar\omega > 2d^{\xi}(k_{\lambda,F}^{\xi}(\theta), \theta) = \hbar\omega_{\lambda}^{\xi}(\theta)$. Sustituyendo la Ec. (5.2.7) en la Ec. (5.2.6) y haciendo la integral en k , se recupera la siguiente expresión para la densidad conjunta de estados

$$\mathcal{J}^{(\xi)}(\omega) = g_s \frac{\hbar\omega}{8\pi\alpha_F^2} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g^2(\theta)} \Theta[\omega - \omega_{\lambda}^{\xi}(\theta)], \quad |\varepsilon_F| > |\Delta^{\xi}|. \quad (5.2.8)$$

La expresión anterior se anula para $\hbar\omega < \hbar\omega_1^{\xi}$, y para $\hbar\omega > \hbar\omega_2^{\xi}$ toda la región angular $0 \leq \theta \leq 2\pi$ contribuye para transiciones verticales, tal que $\mathcal{J}^{(\xi)}(\omega > \omega_2^{\xi}) = (g_s/8\pi)(\hbar\omega/\alpha_x\alpha_y)$. Se observa que esta expresión es independiente del parámetro de inclinación α_t y lineal en la frecuencia. En cambio, para energías $\hbar\omega_1^{\xi} < \hbar\omega < \hbar\omega_2^{\xi}$, la región angular disponible para transiciones interbanda se ve reducida debido al rompimiento de la simetría electrón-hueco. En la Fig. 5.3(c) se observa una gráfica de $\mathcal{J}^{(+)}(\omega)$ para el escenario $|\varepsilon_F| > |\Delta^+|$. En el panel superior se aprecia como

la región angular para energías entre $\hbar\omega_1^+$ y $\hbar\omega_2^+$ está delimitada por una frontera determinada por $\hbar\omega_+^+(\theta)$, tal que para esa región la densidad conjunta de estados no tiene un comportamiento lineal.

Ahora, para el escenario $|\tilde{\Delta}^\xi| < |\varepsilon_F| < |\tilde{\Delta}|$, la integral en Ec. (5.2.1) toma la siguiente forma

$$\mathcal{J}^{(\xi)}(\omega) = \frac{g_s}{(2\pi)^2} \int_{\theta_0 - \theta_\xi^*}^{\theta_0 + \theta_\xi^*} d\theta \left[\int_0^{q_{\lambda,F}^{\xi,-}(\theta)} dk k \delta(2d^\xi(k, \theta) - \hbar\omega) + \int_{q_{\lambda,F}^{\xi,+}(\theta)}^\infty dk k \delta(2d^\xi(k, \theta) - \hbar\omega) \right]. \quad (5.2.9)$$

La primera δ en la expresión anterior se puede escribir nuevamente en función de k de la siguiente manera

$$\delta(2d^\xi(k, \theta) - \hbar\omega) = \Theta[\nu_\lambda^{\xi,-}(\theta) - \omega] \frac{\delta(k - k_r(\theta))}{|\partial_k 2d^\xi(k, \theta)|}, \quad (5.2.10)$$

y la segunda δ

$$\delta(2d^\xi(k, \theta) - \hbar\omega) = \Theta[\omega - \nu_\lambda^{\xi,+}(\theta)] \frac{\delta(k - k_r(\theta))}{|\partial_k 2d^\xi(k, \theta)|}. \quad (5.2.11)$$

De nuevo, la función escalón en la Ec. (5.2.10) proviene de la condición $0 < k < q_{\lambda,F}^{\xi,-}(\theta)$, tal que $2|\Delta^\xi| < \hbar\omega < 2d^\xi(q_{\lambda,F}^{\xi,-}(\theta), \theta) = \hbar\nu_\lambda^{\xi,-}(\theta)$. Mientras que la función escalón en la Ec. (5.2.11) proviene de $k > q_{\lambda,F}^{\xi,+}(\theta)$, por lo que $\hbar\omega > 2d^\xi(q_{\lambda,F}^{\xi,+}(\theta), \theta) = \hbar\nu_\lambda^{\xi,+}(\theta)$. Sustituyendo las deltas de Dirac anteriores en la Ec. (5.2.9) y haciendo la integral en k , se recupera la siguiente expresión para la densidad conjunta de estados en el escenario $|\tilde{\Delta}^\xi| < |\varepsilon_F| < |\tilde{\Delta}|$,

$$\mathcal{J}^{(\xi)}(\omega) = g_s \frac{\hbar\omega}{8\pi\alpha_F^2} \frac{1}{2\pi} \Theta(\hbar\omega - 2|\Delta^\xi|) \int_{\theta_0 - \theta_\xi^*}^{\theta_0 + \theta_\xi^*} \frac{d\theta}{g^2(\theta)} \left\{ \Theta[\nu_\lambda^{\xi,-}(\theta) - \omega] + \Theta[\omega - \nu_\lambda^{\xi,+}(\theta)] \right\}. \quad (5.2.12)$$

La expresión anterior se anula para $\hbar\omega < 2|\Delta^\xi|$. Además, para energías $2|\Delta^\xi| <$

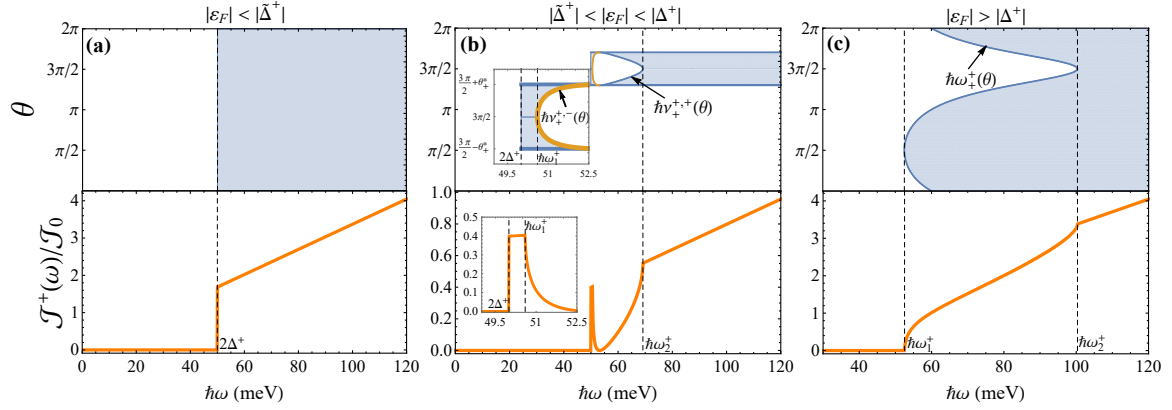


Figura 5.3: Densidad conjunta de estados para transiciones en la vecindad del punto K , donde se ha tomado $\Delta^+ = 25$ meV y se ha definido $\mathcal{J}_0 = (g_s/8\pi)(2|\Delta^+|/\alpha_F^2)$. Se consideran los tres escenarios diferentes para la posición del nivel de Fermi: (a) $|\varepsilon_F| < |\tilde{\Delta}^+|$, (b) $|\tilde{\Delta}^+| < |\varepsilon_F| < |\Delta^+|$ y (c) $|\varepsilon_F| > |\Delta^+|$. En los paneles superiores se observa la región angular disponible para transiciones verticales (región sombreada) para cada escenario.

$\hbar\omega < \hbar\omega_1^\xi$ y $\hbar\omega > \hbar\omega_2^\xi$, la región angular disponible para transiciones verticales está determinada por $|\theta - \theta_0| \leq \theta_\xi^*$, tal que para esas energías la densidad conjunta de estados toma la siguiente forma

$$\mathcal{J}^{(\xi)}(2|\Delta^\xi| < \hbar\omega < \hbar\omega_1^\xi) = \mathcal{J}^{(\xi)}(\hbar\omega > \hbar\omega_2^\xi) = \frac{g_s}{8\pi} \frac{\hbar\omega}{\alpha_x \alpha_y} \left(\frac{1}{2} - \frac{\beta_\xi}{\pi} \right), \quad (5.2.13)$$

donde

$$\tan \beta_\xi = \sqrt{\frac{(\Delta^\xi)^2 - \varepsilon_F^2}{\varepsilon_F^2 - (\tilde{\Delta}^\xi)^2}}. \quad (5.2.14)$$

En la Fig. 5.3(b) se muestra una gráfica de $\mathcal{J}^{(+)}(\omega)$ para el escenario $|\tilde{\Delta}^+| < |\varepsilon_F| < |\Delta^+|$. Se puede apreciar en el panel superior como la región angular disponible para transiciones interbanda se reduce para energías $\hbar\omega_1^+ < \hbar\omega < \hbar\nu_+^{+,-}$ y $\hbar\nu_+^{+,+} < \hbar\omega < \hbar\omega_2^+$, como consecuencia de la inclinación de los conos de Dirac. Además, se observa en la misma figura que la densidad conjunta de estados para este escenario es de magnitud reducida en comparación con los casos $|\varepsilon_F| > |\Delta^+|$ y $|\varepsilon_F| < |\tilde{\Delta}^+|$, debido a la naturaleza indirecta de la brecha de energía.

Finalmente, para el escenario $|\varepsilon_F| < |\tilde{\Delta}^\xi|$, la integral en Ec. (5.2.1) toma la siguiente forma

$$\mathcal{J}^{(\xi)}(\omega) = \frac{g_s}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\infty dk k \delta(2d^\xi(k, \theta) - \hbar\omega). \quad (5.2.15)$$

donde la función δ se puede escribir como

$$\delta(2d^\xi(k, \theta) - \hbar\omega) = \Theta(\hbar\omega - 2|\Delta^\xi|) \frac{\delta(k - k_r(\theta))}{|\partial_k 2d^\xi(k, \theta)|}. \quad (5.2.16)$$

Sustituyendo la expresión anterior en la Ec. (5.2.15) y haciendo la integral en k , la densidad conjunta de estados para el escenario $|\varepsilon_F| < |\tilde{\Delta}^\xi|$ esta dada por

$$\mathcal{J}^{(\xi)}(\omega) = g_s \frac{\hbar\omega}{8\pi\alpha_F^2} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g^2(\theta)} \Theta(\hbar\omega - 2|\Delta^\xi|) = \frac{g_s}{8\pi} \frac{\hbar\omega}{\alpha_x\alpha_y} \Theta(\hbar\omega - 2|\Delta^\xi|). \quad (5.2.17)$$

Se observa que la expresión anterior es independiente del parámetro de inclinación α_t . El comportamiento de la densidad conjunta de estados anterior es similar al del grafeno con brecha de energía, pero de magnitud reducida como consecuencia de la anisotropía en el espectro ($\alpha_x \neq \alpha_y$). En la Fig. 5.3(a) se muestra una gráfica de la densidad conjunta de estados $\mathcal{J}^{(+)}(\omega)$ para el escenario $|\varepsilon_F| < |\tilde{\Delta}^+|$, observando en el panel superior que toda la región angular $0 \leq \theta \leq 2\pi$ contribuye para $\hbar\omega > 2\Delta^+$, y que la densidad conjunta de estados se anula para $\hbar\omega < 2\Delta^+$. En la Fig. 5.4 se muestra un mapa de colores de la densidad conjunta de estados total $\sum_{\xi=\pm} \mathcal{J}^{(\xi)}(\omega; \varepsilon_F)$ como función de la frecuencia y la energía de Fermi. Se ilustra en la Fig. 5.4(a) la densidad conjunta de estados en ausencia de brechas de energía en el espectro ($\Delta^+ = \Delta^- = 0$), donde las curvas punteadas corresponden a las energías críticas $\hbar\omega_{1,2}^\pm(\varepsilon_F)$. En la Fig. 5.4(b) se considera una sola brecha de energía, esto

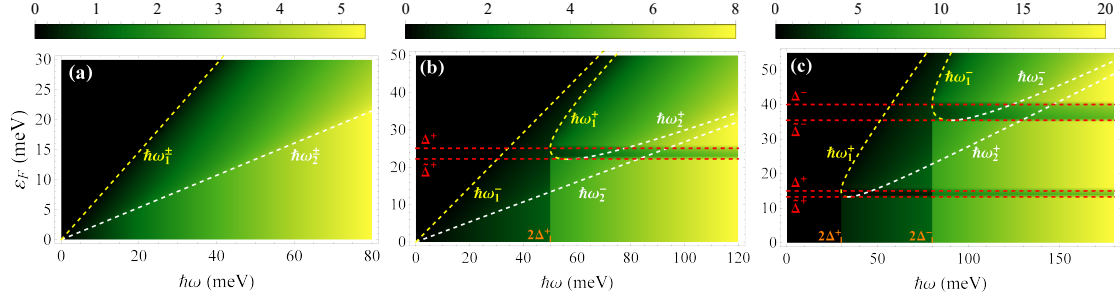


Figura 5.4: Densidad conjunta de estados total $\mathcal{J}(\omega; \varepsilon_F)/\mathcal{J}_0$ considerando; (a) $\Delta^+ = \Delta^- = 0$, (b) $\Delta^+ = 25$ meV y $\Delta^- = 0$, y (c) $\Delta^+ = 15$ meV y $\Delta^- = 40$ meV. En las figuras (c) y (b) se tomó $\mathcal{J}_0$ como en la Fig. 5.3. En (a) se utilizó $\Delta^+ = 25$ meV en $\mathcal{J}_0$.

es, $\Delta^+ \neq 0$ y $\Delta^- = 0$. La contribución correspondiente al cono K' se comporta similarmente al caso de la Fig. 5.4(a). En cambio, la contribución debida al cono K , además de presentar las energías críticas $\hbar\omega_{1,2}^+(\varepsilon_F)$ y el umbral en $2|\Delta^+|$, también presenta evidentemente una reducción en su contribución para energías de Fermi en la zona indirecta, es decir, entre $\tilde{\Delta}^+$ y Δ^+ . Finalmente, en la Fig. 5.4(c) se presenta el caso con brechas energéticas diferentes en ambos valles, tomando $|\Delta^+| > |\Delta^-|$.

5.3. Respuesta óptica lineal: tensor de conductividad

A continuación se estudia el tensor de conductividad óptica dentro del marco de teoría de respuesta lineal, misma que se describió en el Capítulo 3, el cual determina la corriente eléctrica inducida en el sistema por un campo eléctrico homogéneo externo de frecuencia ω . A partir del hamiltoniano en Ec. (5.1.1) y los eigenestados en Ec. (5.1.3), se encuentra que las componentes del tensor de conductividad toman la

siguiente forma

$$\text{Re } \sigma_{ii}^{(\xi)}(\omega) = D_{ii}^{(\xi)} \delta(\omega) + \text{Re } \sigma_{ii}^{(\xi),inter}(\omega), \quad (5.3.1)$$

$$\text{Im } \sigma_{ii}^{(\xi)}(\omega) = \text{Im } \sigma_{ii}^{(\xi),intra}(\omega) + \text{Im } \sigma_{ii}^{(\xi),inter}(\omega), \quad (5.3.2)$$

$$\sigma_{xy}^{(\xi)}(\omega) = -\sigma_{yx}^{(\xi)}(\omega) = \sigma_{xy}^{(\xi),inter}(\omega), \quad (5.3.3)$$

donde la etiqueta *intra* (*inter*) denota la contribución intrabanda (interbanda), y $D_{ii}^{(\xi)} = \pi \lim_{\omega \rightarrow 0} [\omega \text{Im } \sigma_{ii}^{(\xi)}(\omega)] = \pi \lim_{\omega \rightarrow 0} [\omega \text{Im } \sigma_{ii}^{(\xi),intra}(\omega)]$ es el peso de Drude. Además, en el presente modelo se cumple que $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$, esto por el rompimiento de la simetría de inversión temporal. Cabe señalar que el tensor de conductividad total $\sigma_{ij}(\omega)$ esta dado como la suma de las contribuciones en la vecindad de cada punto de Dirac, esto es, $\sigma_{ij}(\omega) = \sum_{\xi=\pm} \sigma_{ij}^{(\xi)}(\omega)$. Por brevedad, en las secciones posteriores solo se presenta el cálculo de la contribución interbanda de la conductividad óptica, sin embargo, cada una de las contribuciones fueron calculadas para el estudio de distintas propiedades ópticas (ver Ref. [99]).

5.3.1. Conductividad interbanda

Para el estudio de la conductividad interbanda, se utiliza la fórmula de Kubo en Ec. (3.1.56). Dado que el sistema que se está considerando es un sistema de dos bandas (conducción y valencia), los índices de banda están dados por $\lambda, \lambda' = \pm$, donde el signo $+$ ($-$) denota la banda de conducción (valencia). Entonces, se definen los siguientes elementos de matriz

$$v_{ij}^{\xi}(\mathbf{k}) = \langle \psi_{+}^{\xi}(\mathbf{k}) | v_i | \psi_{-}^{\xi}(\mathbf{k}) \rangle \langle \psi_{-}^{\xi}(\mathbf{k}) | v_j | \psi_{+}^{\xi}(\mathbf{k}) \rangle, \quad (5.3.4)$$

tal que la fórmula de Kubo para la conductividad interbanda se escribe de la siguiente manera

$$\sigma_{ij}^{(\xi),inter}(\omega) = -ig_s\sigma_0\frac{\hbar^2}{4\pi}\int d^2k\left(\frac{f(\varepsilon_+^\xi(\mathbf{k})) - f(\varepsilon_-^\xi(\mathbf{k}))}{2d^\xi(\mathbf{k})}\right)\left(\frac{v_{ij}^\xi(\mathbf{k})}{2d^\xi(\mathbf{k}) + \hbar\tilde{\omega}} - \frac{v_{ji}^\xi(\mathbf{k})}{2d^\xi(\mathbf{k}) - \hbar\tilde{\omega}}\right), \quad (5.3.5)$$

donde $\sigma_0 = 2e^2/h$. Además, anteriormente se definió $\tilde{\omega} = \omega + i\eta$. A temperatura cero, la función de distribución de Fermi-Dirac se convierte en un escalón unitario, tal que la Ec. (5.3.5) se reescribe como sigue

$$\sigma_{ij}^{(\xi),inter}(\omega) = ig_s\sigma_0\frac{\hbar^2}{4\pi}\int' d^2k\frac{1}{2d^\xi(\mathbf{k})}\left(\frac{v_{ij}^\xi(\mathbf{k})}{2d^\xi(\mathbf{k}) + \hbar\tilde{\omega}} - \frac{v_{ji}^\xi(\mathbf{k})}{2d^\xi(\mathbf{k}) - \hbar\tilde{\omega}}\right), \quad (5.3.6)$$

donde nuevamente la prima en la integral indica la región en el espacio $\mathbf{k}$ para la cual se cumple $\varepsilon_-^\xi(\mathbf{k}) < \varepsilon_F < \varepsilon_+^\xi(\mathbf{k})$. Ahora, es posible escribir los elementos de matriz $v_{ij}^\xi(\mathbf{k})$ en forma general como

$$v_{ij}^\xi(\mathbf{k}) = \text{Re } v_{ij}^\xi(\mathbf{k}) + i \text{Im } v_{ij}^\xi(\mathbf{k}) \quad (5.3.7)$$

Además, recordando que $\eta \rightarrow 0^+$, de las relaciones de Kramers-Kronig es posible rescatar el siguiente resultado

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm i\eta} = \mathcal{P}\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x), \quad (5.3.8)$$

donde $\mathcal{P}$ denota el valor principal de la integral. Considerando lo anterior en la Ec. (5.3.6), la parte real de la conductividad intrabanda toma la siguiente forma

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma_{ij}^{(\xi),inter}(\omega) = & -g_s \sigma_0 \frac{\hbar^2}{4\pi} \int' \frac{d^2 k}{2d^\xi(\mathbf{k})} \left[\text{Im}\{v_{ij}^\xi(\mathbf{k})\} \mathcal{P} \left(\frac{4d^\xi(\mathbf{k})}{(2d^\xi(\mathbf{k}))^2 - (\hbar\omega)^2} \right) \right. \\ & \left. - \pi \text{Re}\{v_{ij}^\xi(\mathbf{k})\} \delta(2d^\xi(\mathbf{k}) - \hbar\omega) \right], \quad (5.3.9) \end{aligned}$$

y la parte imaginaria

$$\begin{aligned} \text{Im } \sigma_{ij}^{(\xi),inter}(\omega) = & -g_s \sigma_0 \frac{\hbar^2}{4\pi} \int' \frac{d^2 k}{2d^\xi(\mathbf{k})} \left[\text{Re}\{v_{ij}^\xi(\mathbf{k})\} \mathcal{P} \left(\frac{2\hbar\omega}{(2d^\xi(\mathbf{k}))^2 - (\hbar\omega)^2} \right) \right. \\ & \left. + \pi \text{Im}\{v_{ij}^\xi(\mathbf{k})\} \delta(2d^\xi(\mathbf{k}) - \hbar\omega) \right], \quad (5.3.10) \end{aligned}$$

tal que $\sigma_{ij}^{(\xi),inter}(\omega) = \text{Re } \sigma_{ij}^{(\xi),inter}(\omega) + i \text{Im } \sigma_{ij}^{(\xi),inter}(\omega)$. Además, se han omitido términos proporcionales a $\delta(2d^\xi(\mathbf{k}) + \hbar\omega)$, ya que ese tipo de términos describen procesos de emisión, y se está considerando que el sistema se encuentra inicialmente en su estado base, por lo que solo se consideran procesos de absorción descritos por $\delta(2d^\xi(\mathbf{k}) - \hbar\omega)$.

Parte real de la conductividad interbanda

Considerando la parte real de la contribución interbanda en Ec. (5.3.9), las componentes en la diagonal del tensor de conductividad toman la siguiente forma

$$\text{Re } \sigma_{ii}^{(\xi),inter}(\omega) = g_s \sigma_0 \frac{\hbar^2}{4} \int' d^2 k \frac{\text{Re}\{v_{ii}^\xi(\mathbf{k})\}}{2d^\xi(\mathbf{k})} \delta(2d^\xi(\mathbf{k}) - \hbar\omega), \quad (5.3.11)$$

donde se ha considerado $\text{Im}\{v_{ii}^\xi(\mathbf{k})\} = 0$, al ser $v_{ij}^\xi(\mathbf{k})$ una matriz hermitiana. Con-

siderando el escenario $|\varepsilon_F| > |\Delta^\xi|$, de la Ec. (5.3.11) se recupera lo siguiente

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma_{ii}^{(\xi),inter}(\omega) &= g_s \frac{\sigma_0}{16} \left\{ \frac{\alpha_x^2}{\alpha_F^2} \frac{\alpha_y^2}{\alpha_F^2} \left[1 - \left(\frac{2\Delta^\xi}{\hbar\omega} \right)^2 \right] \int_0^{2\pi} d\theta \frac{(\delta_{ix} \sin^2 \theta + \delta_{iy} \cos^2 \theta)}{g^4(\theta)} \Theta[\omega - \omega_\lambda^\xi(\theta)] \right. \\ &\quad \left. + \frac{\alpha_i^2}{\alpha_F^2} \left(\frac{2\Delta^\xi}{\hbar\omega} \right)^2 \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g^2(\theta)} \Theta[\omega - \omega_\lambda^\xi(\theta)] \right\}. \end{aligned} \quad (5.3.12)$$

La expresión anterior se anula para $\omega < \omega_1^\xi$, y para $\omega > \omega_2^\xi$ se recupera la siguiente expresión

$$\text{Re } \sigma_{ii}^{(\xi),inter}(\omega > \omega_2^\xi) = g_s \frac{\sigma_0 \pi}{16} \left[1 + \left(\frac{2\Delta^\xi}{\hbar\omega} \right)^2 \right] \frac{v_i}{v_x} \frac{v_i}{v_y}. \quad (5.3.13)$$

Se observa que la cantidad anterior es función de la frecuencia ω , a diferencia del caso sin brecha energética ($\Delta^\xi = 0$). Además, para energías $\hbar\omega \gg 2|\Delta^\xi|$ se recupera la cantidad universal $\text{Re}[\sigma_{xx}^{(\xi),inter}(\omega > \omega_2^\xi)] \times \text{Re}[\sigma_{yy}^{(\xi),inter}(\omega > \omega_2^\xi)] = (e^2/4\hbar)^2$, reportada anteriormente para borofeno 8-*Pmmn* [38]. En la Fig. 5.5(c) se muestra una gráfica de la expresión en Ec. (5.3.12) (con $\xi = +$) para $i = x$ (curva azul) y $i = y$ (curva roja punteada). Al igual que en la densidad conjunta de estados, se manifiestan las frecuencias críticas $\hbar\omega_1^+$ y $\hbar\omega_2^+$. Evidentemente, ambas curvas presentan un comportamiento diferente como consecuencia de la anisotropía en el espectro de energía, esto es, $\sigma_{xx}^\xi(\omega) \neq \sigma_{yy}^\xi(\omega)$.

Ahora, considerando el escenario cuando la energía de Fermi se encuentra en la zona indirecta $|\tilde{\Delta}^\xi| < |\varepsilon_F| < |\Delta^\xi|$, de la Ec. (5.3.11) se recupera la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma_{ii}^{(\xi),inter}(\omega) &= g_s \frac{\sigma_0}{16} \Theta(\hbar\omega - 2|\Delta^\xi|) \left\{ \frac{\alpha_x^2}{\alpha_F^2} \frac{\alpha_y^2}{\alpha_F^2} \left[1 - \left(\frac{2\Delta^\xi}{\hbar\omega} \right)^2 \right] \times \right. \\ &\quad \int_{\theta_0 - \theta_\xi^*}^{\theta_0 + \theta_\xi^*} d\theta \frac{\delta_{ix} \sin^2 \theta + \delta_{iy} \cos^2 \theta}{g^4(\theta)} \left(\Theta[\nu_\lambda^{\xi,-}(\theta) - \omega] + \Theta[\omega - \nu_\lambda^{\xi,+}(\theta)] \right) \\ &\quad \left. + \frac{\alpha_i^2}{\alpha_F^2} \left(\frac{2\Delta^\xi}{\hbar\omega} \right)^2 \int_{\theta_0 - \theta_\xi^*}^{\theta_0 + \theta_\xi^*} \frac{d\theta}{g^2(\theta)} \left(\Theta[\nu_\lambda^{\xi,-}(\theta) - \omega] + \Theta[\omega - \nu_\lambda^{\xi,+}(\theta)] \right) \right\}. \end{aligned} \quad (5.3.14)$$

En la Fig. 5.5(b) se muestra una gráfica de la expresión anterior tomando $\xi = +$. Para este caso, nuevamente la respuesta óptica se ve reducida para energías entre $\hbar\omega_1^+$ y $\hbar\omega_2^+$ como consecuencia de la naturaleza indirecta de las brechas de energía. Además, al igual que en la densidad conjunta de estados, se manifiestan las frecuencias críticas $2\Delta^+$, $\hbar\omega_1^+$ y $\hbar\omega_2^+$. En la Fig. 5.5 también se aprecia que la magnitud de la conductividad interbanda es de magnitud reducida cuando el nivel de Fermi se encuentra en la zona indirecta, en comparación con los escenarios $|\varepsilon_F| > |\Delta^\xi|$ y $|\varepsilon_F| < |\tilde{\Delta}^\xi|$, debido a la reducción del espacio de momentos disponible para transiciones.

Finalmente, considerando el escenario $|\varepsilon_F| < |\tilde{\Delta}^\xi|$, de la Ec. (5.3.11) se recupera la siguiente expresión

$$\text{Re } \sigma_{ii}^{(\xi),inter}(\omega) = g_s \frac{\sigma_0 \pi}{16} \left[1 + \left(\frac{2\Delta^\xi}{\hbar\omega} \right)^2 \right] \frac{v_i}{v_x} \frac{v_i}{v_y} \Theta(\hbar\omega - 2|\Delta^\xi|). \quad (5.3.15)$$

Para las componentes anteriores se verifica que $v_y^2 \text{Re } \sigma_{xx}^{(\xi),inter}(\omega) = v_x^2 \text{Re } \sigma_{yy}^{(\xi),inter}(\omega)$. Al igual que en la densidad conjunta de estados, la respuesta óptica para este escenario es independiente de v_t . Además, la Ec. (5.3.15) se reduce al resultado conocido para grafeno con brecha de energía al tomar $v_x = v_y$. En la Fig. 5.5(a) se muestra una gráfica de la parte real de la conductividad interbanda para el escenario $|\varepsilon_F| < |\tilde{\Delta}^\xi|$, para transiciones en la vecindad del cono K ($\xi = +$). Evidentemente se aprecia la única frecuencia crítica $2\Delta^+$, además de la anisotropía en la conductividad.

5.3.2. Conductividad Hall

La presencia del término de masa $\Delta^\xi \sigma_z$ en el hamiltoniano en Ec. (5.1.1) da lugar a una respuesta Hall $\sigma_{xy}(\omega) = \sum_{\xi=\pm} \sigma_{xy}^{(\xi)}(\omega)$. La conductividad Hall permanece finita siempre y cuando la simetría de inversión temporal deje de preservarse haciendo

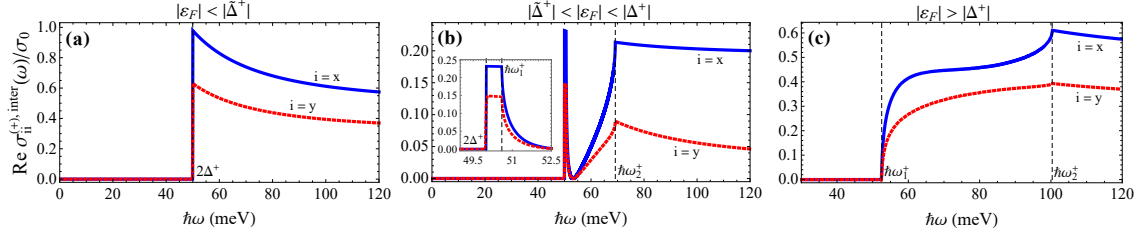


Figura 5.5: Parte real de las componentes en la diagonal de la contribución interbanda del tensor de conductividad, para transiciones en la vecindad del valle K ($\xi = +$) considerando $\Delta^+ = 25$ meV. Se muestran los tres escenarios para la posición del nivel de Fermi: (a) $|\varepsilon_F| < |\tilde{\Delta}^\xi|$, (b) $|\tilde{\Delta}^\xi| < |\varepsilon_F| < |\Delta^\xi|$ y (c) $|\varepsilon_F| > |\Delta^\xi|$. En todos los casos se manifiestan frecuencias críticas, tal como en la densidad conjunta de estados, así como la anisotropía en la conductividad ($\sigma_{xx}(\omega) \neq \sigma_{yy}(\omega)$).

$\Delta^+ \neq \Delta^-$. Para el escenario $|\varepsilon_F| > |\Delta^\xi|$, de la Ec. (5.3.9) se encuentra que la parte real de la conductividad Hall toma la siguiente forma

$$\text{Re } \sigma_{xy}^{(\xi)}(\omega) = \xi g_s \sigma_0 \frac{\Delta^\xi}{4\hbar\omega} \frac{\alpha_x}{\alpha_F} \frac{\alpha_y}{\alpha_F} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g^2(\theta)} \ln \left| \frac{\hbar\omega - \hbar\omega_\lambda^\xi(\theta)}{\hbar\omega + \hbar\omega_\lambda^\xi(\theta)} \right|. \quad (5.3.16)$$

Se observa que la expresión anterior es proporcional a $\xi\Delta^\xi$. Al considerar el caso isotrópico ($v_x = v_y$), se recupera la expresión correspondiente al grafeno. Además, la conductividad Hall total se anula cuando $\Delta^+ = \Delta^-$, tal como se comentó anteriormente, ya que las contribuciones en la vecindad de cada valle adquieren la misma magnitud con signos opuestos.

Ahora, considerando el nivel de Fermi en la zona indirecta $|\tilde{\Delta}^\xi| < |\varepsilon_F| < |\Delta^\xi|$, de la Ec. (5.3.9) se recupera la siguiente expresión para la parte real de la conductividad Hall

$$\text{Re } \sigma_{xy}^{(\xi)}(\omega) = \xi g_s \sigma_0 \frac{\Delta^\xi}{4\hbar\omega} \frac{\alpha_x}{\alpha_F} \frac{\alpha_y}{\alpha_F} \frac{1}{2\pi} \int_{\theta_0 - \theta_\xi^*}^{\theta_0 + \theta_\xi^*} \frac{d\theta}{g^2(\theta)} \ln \left| \frac{\hbar\omega - 2\Delta^\xi}{\hbar\omega + 2\Delta^\xi} \cdot \frac{\hbar\omega - \hbar\nu_\lambda^{\xi,+}(\theta)}{\hbar\omega + \hbar\nu_\lambda^{\xi,+}(\theta)} \cdot \frac{\hbar\omega + \hbar\nu_\lambda^{\xi,-}(\theta)}{\hbar\omega - \hbar\nu_\lambda^{\xi,-}(\theta)} \right|. \quad (5.3.17)$$

Nuevamente la expresión anterior es proporcional a $\xi\Delta^\xi$, tal que la respuesta Hall total se anula al considerar términos de masa iguales en los puntos K y K' .

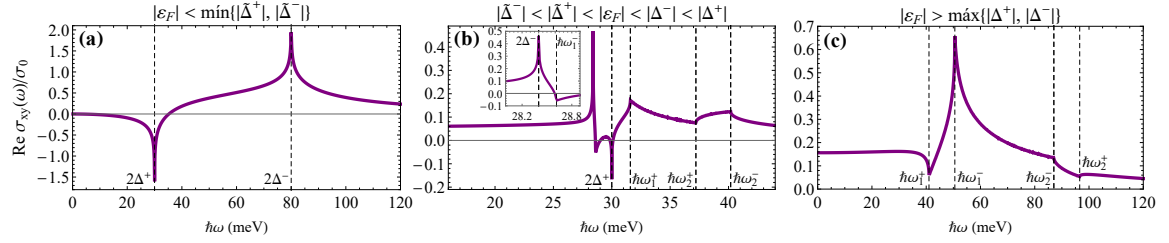


Figura 5.6: Parte real de la conductividad Hall total considerando términos de masa diferentes en cada valle para distintas posiciones del nivel de Fermi. (a) Nivel de Fermi en la brecha de energía de ambos valles, considerando $\Delta^+ = 15$ meV y $\Delta^- = 40$ meV. (b) Nivel de Fermi en la zona indirecta de ambos conos de Dirac, considerando $\Delta^+ = 15$ meV y $\Delta^- = 14.2$ meV. (c) Nivel de Fermi por arriba de las zonas indirectas, considerando $\Delta^+ = 15$ meV y $\Delta^- = 25$ meV. En todos los casos se manifiestan las frecuencias críticas correspondiente a cada valle.

Finalmente, para el escenario $|\varepsilon_F| < |\tilde{\Delta}^\xi|$, de la Ec. (5.3.9) se recupera la siguiente expresión

$$\text{Re } \sigma_{xy}^{(\xi)}(\omega) = \xi g_s \sigma_0 \frac{\Delta^\xi}{4\hbar\omega} \ln \left| \frac{\hbar\omega - 2\Delta^\xi}{\hbar\omega + 2\Delta^\xi} \right|. \quad (5.3.18)$$

Se observa que la expresión anterior es independiente de la anisotropía en el espectro y del parámetro de inclinación v_t , por lo que el resultado anterior coincide con el resultado correspondiente al caso del grafeno con brecha de energía. Además, al igual que en los escenarios anteriores, la conductividad Hall para este escenario es proporcional a $\xi \Delta^\xi$. En la Fig. 5.6 se muestra la parte real de la conductividad Hall total $\text{Re } \sigma_{xy}(\omega) = \sum_{\xi=\pm} \text{Re } \sigma_{xy}^{(\xi)}(\omega)$ para distintas posiciones del nivel de Fermi y brechas de energía diferentes. En cada una de las gráficas se manifiestan frecuencias críticas de la respuesta de cada valle, abriendo la posibilidad de poder anticipar la respuesta óptica total estudiando la respuesta en la vecindad de cada valle por separado. Por ejemplo, en la Fig. 5.6(c) se considera una energía de Fermi $|\varepsilon_F| > \max\{|\Delta^+|, |\Delta^-|\}$, en donde se manifiestan las frecuencias críticas $\hbar\omega_1^+$ y $\hbar\omega_2^+$, correspondiente al cono K , y las frecuencias $\hbar\omega_1^-$ y $\hbar\omega_2^-$, correspondiente al cono K' .

5.3.3. Respuesta longitudinal

Como se discutió anteriormente, la naturaleza anisotrópica del espectro de energía da lugar a expresiones diferentes para las componentes en la diagonal del tensor de conductividad, esto es, $\sigma_{xx}(\omega) \neq \sigma_{yy}(\omega)$. Es posible estudiar la respuesta óptica anisotrópica a través de la conductividad longitudinal $\sigma_{||}(\omega; \varphi)$, la cual determina la densidad de corriente inducida $\mathbf{J}_{||}$ en dirección del campo eléctrico aplicado $\mathbf{E}$, esto es, $\mathbf{J}_{||} = \sigma_{||}\mathbf{E}$, donde φ es el ángulo azimutal en el espacio real del campo externo. Entonces, la conductividad longitudinal queda definida como $\sigma_{||}(\omega; \varphi) = \sum_{i,j} \hat{q}_i \sigma_{ij}(\omega) \hat{q}_j$, donde $\hat{\mathbf{q}} = \cos \varphi \hat{\mathbf{x}} + \sin \varphi \hat{\mathbf{y}}$, tal que para el valle ξ se recupera la siguiente expresión

$$\sigma_{||}^{(\xi)}(\omega; \varphi) = \sigma_{xx}^{(\xi)}(\omega) \cos^2 \varphi + \sigma_{yy}^{(\xi)}(\omega) \sin^2 \varphi + \cos \varphi \sin \varphi [\sigma_{xy}^{(\xi)}(\omega) + \sigma_{yx}^{(\xi)}(\omega)]. \quad (5.3.19)$$

Como se discutió anteriormente, las componentes fuera de la diagonal del tensor de conductividad satisfacen $\sigma_{yx}^{(\xi)}(\omega) = -\sigma_{xy}^{(\xi)}(\omega)$, por el rompimiento de la simetría de inversión temporal. Entonces, la Ec. (5.3.19) se reduce a

$$\sigma_{||}^{(\xi)}(\omega; \varphi) = \sigma_{xx}^{(\xi)}(\omega) \cos^2 \varphi + \sigma_{yy}^{(\xi)}(\omega) \sin^2 \varphi. \quad (5.3.20)$$

En la Fig. 5.7 se muestran gráficas polares de la parte real de la conductividad longitudinal en la vecindad del valle K , considerando los tres distintos escenarios para el nivel de Fermi. En todos los casos se observa una fuerte dependencia de la respuesta óptica como función del ángulo φ , manifestándose además cada una de las frecuencias críticas anticipadas por la densidad conjunta de estados. En la Fig. 5.7(b), correspondiente al escenario con el nivel de Fermi en la zona indirecta $|\tilde{\Delta}^+| < |\varepsilon_F| < |\Delta^+|$, se aprecia que la anisotropía para energías por debajo de $\hbar\omega_2^+$

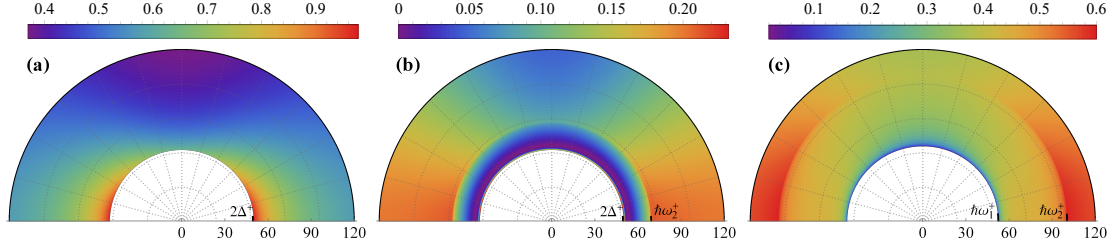


Figura 5.7: Parte real de la conductividad longitudinal $\text{Re } \sigma_{||}^{(+)}(\omega; \varphi)$ tomando $\Delta^+ = 25$ meV para los tres escenarios posibles del nivel de Fermi: (a) $|\varepsilon_F| < |\tilde{\Delta}^+|$, (b) $|\tilde{\Delta}^+| < |\varepsilon_F| < |\Delta^+|$ y (c) $|\varepsilon_F| > |\Delta^+|$. Se observa en cada uno de los casos como la magnitud de la conductividad longitudinal (representada con color) depende fuertemente del ángulo azimutal φ , como consecuencia de la anisotropía en las bandas de energía ($v_x \neq v_y$).

es apenas evidente, como consecuencia de la reducción del espacio de momentos disponible para transiciones.

5.4. Conductividad Hall anómala y de valle

Como consecuencia del rompimiento de la simetría de inversión temporal a través de diferentes términos de masa en cada punto de Dirac, la curvatura de Berry total $\Omega_{\lambda,z}(\mathbf{k}) = \sum_{\xi=\pm} \Omega_{\lambda,z}^{\xi}(\mathbf{k})$ permanece finita. Por consiguiente, se manifiesta una polarización de carga transversal al campo eléctrico externo a frecuencia cero, dando lugar a una conductividad Hall anómala (o AHE por sus siglas en inglés), la cual está definida por

$$\sigma^{AHE} = \sigma_{xy}^{(+)}(0) + \sigma_{xy}^{(-)}(0), \quad (5.4.1)$$

donde, de acuerdo a la Ec. (3.2.2), la conductividad Hall estática en el valle ξ está dada por

$$\sigma_{xy}^{(\xi)}(0) = -g_s \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\lambda} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} f(\varepsilon_{\lambda}^{\xi}(\mathbf{k})) \Omega_{\lambda,z}^{\xi}(\mathbf{k}). \quad (5.4.2)$$

Considerando el hamiltoniano en Ec. (5.1.1) y los correspondientes eigenestados en Ec. (5.1.3), de la Ec. (3.2.3) se encuentra la siguiente expresión para la curvatura de Berry

$$\Omega_{\lambda,z}^{\xi}(\mathbf{k}) = -\xi\lambda \frac{\alpha_x \alpha_y \Delta^{\xi}}{2(\alpha_x k_x + \alpha_y k_y + \Delta^{\xi})^{3/2}}. \quad (5.4.3)$$

Evidentemente, la curvatura de Berry es anisotrópica en el espacio de momentos, al igual que las bandas de energía, y de magnitud menor en comparación con el caso isotrópico de grafeno con brecha.

Considerando los diferentes escenarios para la posición del nivel de Fermi, se calcula la respuesta Hall estática a temperatura cero. Para el escenario $|\varepsilon_F| > |\Delta^{\xi}|$ se recupera la siguiente expresión

$$\frac{\sigma_{xy}^{\xi}(0)}{-(e^2/h)} = \xi \frac{\Delta^{\xi}}{\sqrt{\varepsilon_F^2 + \gamma^2(\Delta^{\xi})^2}}. \quad (5.4.4)$$

Se observa que la expresión anterior es independiente de la anisotropía en el espectro, y depende de la inclinación de las bandas de energía a través del parámetro γ . Al tomar $\gamma = 0$, la expresión anterior se reduce a la expresión correspondiente al caso de grafeno con brecha.

Para el escenario correspondiente al nivel de Fermi en la zona indirecta $|\tilde{\Delta}^{\xi}| < |\varepsilon_F| < |\Delta^{\xi}|$, se recupera la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_{xy}^{\xi}(0)}{-(e^2/h)} &= \xi \frac{\Delta^{\xi}}{\pi} \frac{\alpha_x}{\alpha_F} \frac{\alpha_y}{\alpha_F} \frac{\alpha_t}{\alpha_F} \int_{\theta_0 - \theta_{\xi}^*}^{\theta_0 + \theta_{\xi}^*} d\theta \frac{\sin \theta}{g^2(\theta)} \frac{\sqrt{\varepsilon_F^2 g^2(\theta) - (\Delta^{\xi})^2 [g^2(\theta) - h^2(\theta)]}}{\varepsilon_F^2 g^2(\theta) + (\Delta^{\xi})^2 h^2(\theta)} \\ &\quad + \xi \operatorname{sgn}(\Delta^{\xi}) \left(\frac{1}{2} - \frac{\beta_{\xi}}{\pi} \right), \end{aligned} \quad (5.4.5)$$

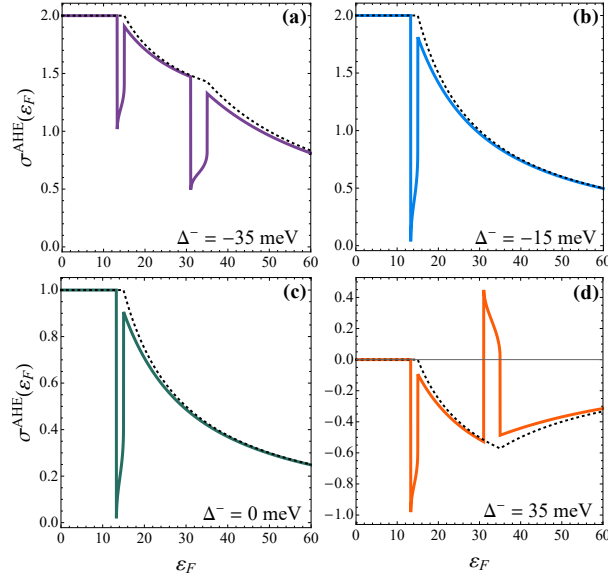


Figura 5.8: Conductividad Hall anómala (en unidades de $-e^2/h$) considerando $\Delta^+ = 15$ meV en función de la energía de Fermi, tomando varios valores de Δ^- : (a) $\Delta^- = -35$ meV, (b) $\Delta^- = -15$ meV, (c) $\Delta^- = 0$ y (d) $\Delta^- = 35$ meV. La curva negra punteada corresponde al caso de grafeno con brechas de energía no uniformes.

donde $\text{sgn}(z)$ es la función signo. Finalmente, para el caso $|\varepsilon_F| < |\tilde{\Delta}^\xi|$ se obtiene

$$\frac{\sigma_{xy}^\xi(0)}{-(e^2/h)} = \xi \text{sgn}(\Delta^\xi). \quad (5.4.6)$$

Se observa que el resultado anterior es independiente tanto de la anisotropía del espectro como de la inclinación de las bandas de energía. La conductividad Hall anómala para una energía de Fermi en la brecha de energía de ambos conos, esto es, $|\varepsilon_F| < \min\{|\tilde{\Delta}^+|, |\tilde{\Delta}^-|\}$, esta dada por la cantidad universal $\sigma^{AHE} = -(\text{sgn}(\Delta^+) - \text{sgn}(\Delta^-))e^2/h$, la cual puede tomar los valores $\pm 2e^2/h, 0$. Este resultado fue reportado para grafeno en ausencia de simetría de inversión temporal [63] y para el modelo de Haldane [81]. En la Fig. 5.8 se muestra una serie de gráficas de la conductividad Hall anómala considerando $\Delta^+ = 15$ meV y varios valores de Δ^- , en función de la energía de Fermi, así como las curvas correspondientes al caso de grafeno ($v_x = v_y = v_F$ y

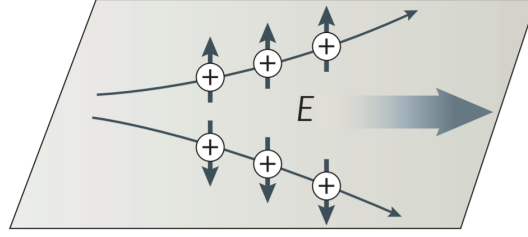


Figura 5.9: Ilustración del efecto Hall de valle. Un campo eléctrico E es aplicado al sistema, tal que los portadores de carga en cada valle (representados con flechas perpendiculares al plano) se mueven en direcciones opuestas y perpendicular a la corriente de deriva, debido a que la curvatura de Berry adquiere signos contrarios en la vecindad de cada punto de Dirac. Imagen extraída de Ref. [56].

$v_t = 0$). En las Figs. 5.8(a)-(b) las curvas comienzan en el valor universal $-2e^2/h$, dado que en ambos casos se ha considerado $\text{sgn}(\Delta^+) \neq \text{sgn}(\Delta^-)$. En cambio, la curva de la Fig. 5.8(c) comienza en el valor universal $-e^2/h$, ya que se ha considerado en este caso $\Delta^- = 0$, por lo que no hay contribución debida al cono K' . Finalmente, en la Fig. 5.8(d) se considera el caso $\text{sgn}(\Delta^+) = \text{sgn}(\Delta^-)$, por lo que la curva comienza en cero. Evidentemente se aprecia en cada una de las gráficas una desviación con respecto al caso de grafeno (curva negra punteada) mayormente pronunciada cuando la energía de Fermi toma valores en las brechas indirectas ($|\tilde{\Delta}^\xi| < |\varepsilon_F| < |\Delta^\xi|$), ya que en esa región la respuesta se reduce debido a la presencia simultanea de brechas de energía y la inclinación de las bandas.

Por otro lado, el efecto Hall de valle (o VHE por sus siglas en inglés) está definido como $\sigma^{VHE} = \sigma_{xy}^{(+)}(0) - \sigma_{xy}^{(-)}(0)$. La conductividad Hall de valle se manifiesta al romper la simetría de inversión espacial, tal que al considerar $\Delta^+ = -\Delta^-$, el sistema preserva dicha simetría y un correspondiente VHE nulo. En la Fig. 5.9 se observa un esquema de este efecto, ilustrando como los portadores de carga en cada valle se mueven en direcciones opuestas y transversal al campo eléctrico aplicado. Gráficas similares a las presentes en la Fig. 5.9 se recuperan para la conductividad Hall de valle

haciendo $\Delta^- \rightarrow -\Delta^-$, manifestándose nuevamente una modificación en la respuesta para valores de la energía de Fermi en la zona indirecta.

5.5. Dispersión electromagnética

Para el estudio de la reflexión y transmisión óptica, se considera un sistema bidimensional en el plano XY con un tensor de conductividad $\sigma_{ij}(\omega)$, el cual separa dos medios homogéneos con constantes dieléctricas ϵ_1 y ϵ_2 . Una onda electromagnética con amplitud de campo eléctrico $E_{p,s}^i$ incide por el medio con constante dieléctrica ϵ_1 , generando una onda reflejada hacia el mismo medio y una onda transmitida hacia el medio con constante dieléctrica ϵ_2 . Las amplitudes del campo eléctrico reflejado $E_{p,s}^r$ y transmitido $E_{p,s}^t$ se pueden escribir en términos de los coeficientes de reflexión y transmisión de Fresnel de la siguiente manera

$$\begin{pmatrix} E_p^r \\ E_s^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{pp} & r_{ps} \\ r_{sp} & r_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_p^i \\ E_s^i \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} E_p^t \\ E_s^t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{pp} & t_{ps} \\ t_{sp} & t_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_p^i \\ E_s^i \end{pmatrix}, \quad (5.5.1)$$

donde los subíndices p y s denotan polarización p ($\phi = 0$) y polarización s ($\phi = \pi/2$), con ϕ el ángulo de polarización medido desde el plano de incidencia (ver Fig. 5.10). En la Fig. 5.10 se muestra un esquema del problema de dispersión para una onda incidente con polarización p . Los coeficientes $r_{\mu\nu}$ ($t_{\mu\nu}$) son las amplitudes de reflexión (transmisión) de Fresnel que corresponden a una onda incidente ν -polarizada la cual genera una onda reflejada (transmitida) μ -polarizada.

Por otro lado, de las ecuaciones de Maxwell, los campos eléctricos deben satisfacer

las siguientes condiciones de frontera

$$\hat{\mathbf{z}} \cdot [\epsilon_2 \mathbf{E}^t - \epsilon_1 (\mathbf{E}^i + \mathbf{E}^r)] = 4\pi \sigma_s(\omega), \quad (5.5.2)$$

$$\hat{\mathbf{z}} \times [\mathbf{E}^t - (\mathbf{E}^i + \mathbf{E}^r)] = \mathbf{0}, \quad (5.5.3)$$

$$\hat{\mathbf{z}} \cdot [\mathbf{B}^t - (\mathbf{B}^i + \mathbf{B}^r)] = 0, \quad (5.5.4)$$

$$\hat{\mathbf{z}} \times [\mathbf{B}^t - (\mathbf{B}^i + \mathbf{B}^r)] = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J}_s(\omega), \quad (5.5.5)$$

donde la densidad de carga superficial inducida $\sigma_s(\omega)$ se relaciona con la densidad de corriente inducida $\mathbf{J}_s(\omega) = (J_{s,x}(\omega), J_{s,y}(\omega), 0)$ a través de la ecuación de continuidad $k_x J_{s,x}(\omega) = \omega \sigma_s(\omega)$, donde k_x es la componente en $\hat{\mathbf{x}}$ del vector de onda del campo eléctrico externo. Además, la densidad de corriente inducida y el tensor de conductividad del sistema bidimensional se relacionan a través de la Ley de Ohm,

$$J_{s,x}(\omega) = \sigma_{xx}(\omega) E_x^t + \sigma_{xy}(\omega) E_y^t = \sigma_{xx}(\omega) \frac{k_z^t}{k^t} E_p^t + \sigma_{xy}(\omega) E_s^t, \quad (5.5.6)$$

$$J_{s,y}(\omega) = \sigma_{yx}(\omega) E_x^t + \sigma_{yy}(\omega) E_y^t = \sigma_{yx}(\omega) \frac{k_z^t}{k^t} E_p^t + \sigma_{yy}(\omega) E_s^t, \quad (5.5.7)$$

con k_z^t la componente en $\hat{\mathbf{z}}$ del vector de onda del campo transmitido y k^t su módulo. Combinando las condiciones de frontera y las ecuaciones matriciales (5.5.1), se

recuperan los siguientes coeficientes de reflexión de Fresnel

$$r_{pp} = \frac{(\epsilon_2 k_z^i - \epsilon_1 k_z^t + 4\pi \frac{\sigma_{xx}}{\omega} k_z^i k_z^t)(k_z^i + k_z^t + \frac{4\pi}{c} k_0 \sigma_{yy}) - \left(\frac{4\pi}{c}\right)^2 \sigma_{xy} \sigma_{yx} k_z^i k_z^t}{(\epsilon_2 k_z^i + \epsilon_1 k_z^t + 4\pi \frac{\sigma_{xx}}{\omega} k_z^i k_z^t)(k_z^i + k_z^t + \frac{4\pi}{c} k_0 \sigma_{yy}) - \left(\frac{4\pi}{c}\right)^2 \sigma_{xy} \sigma_{yx} k_z^i k_z^t}, \quad (5.5.8)$$

$$r_{sp} = -\frac{\frac{8\pi}{c} \sigma_{yx} \sqrt{\epsilon_1} k_z^i k_z^t}{(\epsilon_2 k_z^i + \epsilon_1 k_z^t + 4\pi \frac{\sigma_{xx}}{\omega} k_z^i k_z^t)(k_z^i + k_z^t + \frac{4\pi}{c} k_0 \sigma_{yy}) - \left(\frac{4\pi}{c}\right)^2 \sigma_{xy} \sigma_{yx} k_z^i k_z^t}, \quad (5.5.9)$$

$$r_{ps} = \frac{\frac{8\pi}{c} \sigma_{xy} \sqrt{\epsilon_1} k_z^i k_z^t}{(\epsilon_2 k_z^i + \epsilon_1 k_z^t + 4\pi \frac{\sigma_{xx}}{\omega} k_z^i k_z^t)(k_z^i + k_z^t + \frac{4\pi}{c} k_0 \sigma_{yy}) - \left(\frac{4\pi}{c}\right)^2 \sigma_{xy} \sigma_{yx} k_z^i k_z^t}, \quad (5.5.10)$$

$$r_{ss} = \frac{(\epsilon_2 k_z^i + \epsilon_1 k_z^t + 4\pi \frac{\sigma_{xx}}{\omega} k_z^i k_z^t)(k_z^i - k_z^t - \frac{4\pi}{c} k_0 \sigma_{yy}) + \left(\frac{4\pi}{c}\right)^2 \sigma_{xy} \sigma_{yx} k_z^i k_z^t}{(\epsilon_2 k_z^i + \epsilon_1 k_z^t + 4\pi \frac{\sigma_{xx}}{\omega} k_z^i k_z^t)(k_z^i + k_z^t + \frac{4\pi}{c} k_0 \sigma_{yy}) - \left(\frac{4\pi}{c}\right)^2 \sigma_{xy} \sigma_{yx} k_z^i k_z^t}, \quad (5.5.11)$$

y los coeficientes de transmisión de Fresnel

$$t_{pp} = \frac{1}{F(\theta_i)} \sqrt{\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}} (1 - r_{pp}), \quad (5.5.12)$$

$$t_{sp} = r_{sp}, \quad (5.5.13)$$

$$t_{ps} = -\frac{1}{F(\theta_i)} \sqrt{\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}} r_{ps}, \quad (5.5.14)$$

$$t_{ss} = 1 + r_{ss}, \quad (5.5.15)$$

donde $F(\theta_i) = k_z^t/k_z^i = \sqrt{(\epsilon_2/\epsilon_1) - \sin^2 \theta_i} / \cos \theta_i$, $k_0 = \omega/c$, k_z^i la componente en $\hat{\mathbf{z}}$ del vector de onda del campo incidente y θ_i el ángulo de incidencia (ver Fig. 5.10). Se observa que los coeficientes $r_{\mu\nu}$ y $t_{\mu\nu}$ para $\mu \neq \nu$ son proporcionales a la respuesta Hall $\sigma_{xy}(\omega)$, tal que si el sistema preserva la simetría de inversión temporal dichos coeficientes se anulan.

Una vez conocidos los coeficientes de reflexión y transmisión de Fresnel, es posible estudiar la fracción de radiación que es reflejada y transmitida por el sistema bidimensional, determinada por la reflectividad (R) y transmisividad óptica (T),

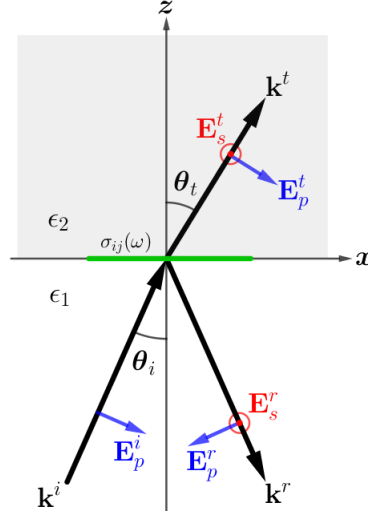


Figura 5.10: Esquema del problema de dispersión electromagnética de Fresnel. Un sistema bidimensional en el plano XY con tensor de conductividad $\sigma_{ij}(\omega)$ (ilustrado en verde) separa dos medios con constantes dieléctricas ϵ_1 y ϵ_2 . Se ilustra el caso particular de una onda electromagnética p -polarizada ($\phi = 0$) que incide por el medio con constante dieléctrica ϵ_1 con un vector de onda $\mathbf{k}^i$ en el plano XZ a un ángulo de incidencia θ_i . La onda electromagnética es transmitida hacia el medio con constante dieléctrica ϵ_2 a un ángulo θ_t y vector de onda $\mathbf{k}^t$, y reflejada a un ángulo θ_i con vector de onda $\mathbf{k}^r$.

respectivamente, definidas de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
 R(\omega, \theta_i, \phi; \varepsilon_F) &= (|r_{pp}|^2 + |r_{sp}|^2) \cos^2 \phi + (|r_{ss}|^2 + |r_{ps}|^2) \sin^2 \phi \\
 &\quad + 2 \operatorname{Re} \{r_{pp}r_{ps}^* + r_{ss}r_{sp}^*\} \sin \phi \cos \phi,
 \end{aligned} \tag{5.5.16}$$

$$\begin{aligned}
 T(\omega, \theta_i, \phi; \varepsilon_F) &= F(\theta_i) [(|t_{pp}|^2 + |t_{sp}|^2) \cos^2 \phi + (|t_{ss}|^2 + |t_{ps}|^2) \sin^2 \phi \\
 &\quad + 2 \operatorname{Re} \{t_{pp}t_{ps}^* + t_{ss}t_{sp}^*\} \sin \phi \cos \phi].
 \end{aligned} \tag{5.5.17}$$

De acuerdo al tensor de conductividad de sistemas bidimensionales con conos de Dirac anisotrópicos e inclinados estudiado en la Sección 5.3, para una onda electromagnética incidente μ -polarizada ($\mu = p$ o s) es válido aproximar $R(\omega) \approx |r_{\mu\mu}(\omega)|^2$ y $T(\omega) \approx F(\theta_i)|t_{\mu\mu}(\omega)|^2$, ya que se cumple que $|\sigma_{xy}/c|^2 \ll 1$, haciendo posible des-

preciar el módulo al cuadrado de los coeficientes de Fresnel $r_{\mu\nu}$ y $t_{\mu\nu}$ ($\mu \neq \nu$) en las Ecs. (5.5.16)-(5.5.17).

5.5.1. Opacidad óptica

Una de las propiedades ópticas que ofrece información acerca de las transiciones interbanda es la absorbanza, definida como $1 - R(\omega; \phi) - T(\omega; \phi)$, la cual es una medida de la cantidad de luz absorbida por el sistema. Cabe señalar que la reflectividad en el sistema estudiado es del orden $R \sim 10^{-4}$, por lo que la absorbanza es determinada en gran medida por la *opacidad óptica*, la cual está definida como $1 - T(\omega; \phi)$. En la Fig. 5.11 se muestran gráficas de la opacidad óptica en función de la frecuencia a incidencia normal ($\theta_i = 0$) y diferentes valores del ángulo de polarización ϕ y de la energía de Fermi.

A incidencia normal y considerando medios con misma constante dieléctrica ($F(\theta_i) = 1$), la opacidad óptica se puede aproximar como $1 - T(\omega) \approx (4\pi/c)\text{Re } \sigma_{ii}(\omega)$, con $i = x$ (y) para una onda electromagnética incidente p (s)-polarizada, asumiendo $|\sigma_{ii}(\omega)|/c \ll 1$ para frecuencias suficientemente altas en el rango de transiciones interbanda. Esto es, el comportamiento espectral de la opacidad óptica queda determinado principalmente por la parte real de las componentes en la diagonal del tensor de conductividad. Este resultado se puede apreciar en el comportamiento de las curvas en la Fig. 5.11 para $\phi = 0$ y $\phi = \pi/2$, comparando con las correspondientes curvas en la Fig. 5.5.

Para comparar con el resultado importante de la opacidad óptica del grafeno en el vacío ($\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1$) a incidencia normal, $1 - T \approx \pi\alpha = 2.3\%$ [54], donde $\alpha = e^2/\hbar c$ es la constante de estructura fina, se consideran expresiones analíticas de la opacidad

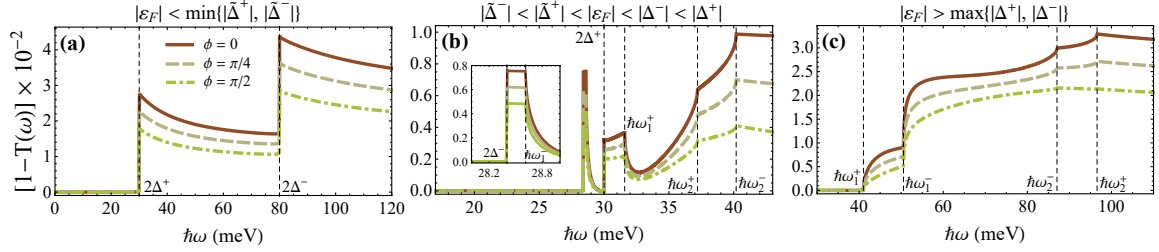


Figura 5.11: Opacidad óptica $1 - T(\omega)$ a incidencia normal ($\theta_i = 0$) para distintos ángulos de incidencia ϕ y tomando $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1$ (aire), para varias posiciones del nivel de Fermi. (a) Energía de Fermi en la brecha energética de ambos valles, tomando $\Delta^+ = 15$ meV y $\Delta^- = 40$ meV. (b) Nivel de Fermi en la brecha indirecta de energía de ambos valles, considerando $\Delta^+ = 15$ meV y $\Delta^- = 14.2$ meV. Finalmente en (c) se muestra el escenario cuando la energía de Fermi se encuentra por arriba de las zonas indirectas de ambos valles, tomando $\Delta^+ = 15$ meV y $\Delta^- = 25$ meV.

para algunos escenarios. Cuando la posición del nivel de Fermi se encuentra en la brecha de energía de ambos valles $|\varepsilon_F| < \min\{|\tilde{\Delta}^+|, |\tilde{\Delta}^-|\}$, se recupera la siguiente expresión

$$1 - T(\omega) \approx \frac{\pi\alpha}{2} \frac{v_i^2}{v_x v_y} \left\{ \left[1 + \left(\frac{2\Delta^+}{\hbar\omega} \right)^2 \right] \Theta(\hbar\omega - 2|\Delta^+|) + \left[1 + \left(\frac{2\Delta^-}{\hbar\omega} \right)^2 \right] \Theta(\hbar\omega - 2|\Delta^-|) \right\}, \quad (5.5.18)$$

donde se ha utilizado la Ec. (5.3.15). Para una energía de Fermi por arriba de las zonas indirectas $|\varepsilon_F| > \max\{|\Delta^+|, |\Delta^-|\}$ y frecuencias $\omega > \max\{\omega_2^+, \omega_2^-\}$, se obtiene lo siguiente

$$1 - T(\omega) \approx \frac{\pi\alpha}{2} \frac{v_i^2}{v_x v_y} \left[2 + \left(\frac{2\Delta^+}{\hbar\omega} \right)^2 + \left(\frac{2\Delta^-}{\hbar\omega} \right)^2 \right], \quad (5.5.19)$$

donde se ha utilizado la expresión en Ec. (5.3.13). De los resultados anteriores se observa que para energías $\hbar\omega \gg \max\{2\Delta^+, 2\Delta^-\}$, la opacidad óptica se reduce a $(2.3\%)(v_i^2/v_x v_y)$, esto es, 2.9% para $i = x$ ($\phi = 0$) y 1.8% para $i = y$ ($\phi = \pi/2$), las cuales son cantidades muy cercanas al resultado del grafeno. Además, como se muestra en la Fig. 5.11(b), al considerar la posición del nivel de Fermi en las zonas indirectas de ambos valles la transmisión aumenta, tal que la opacidad óptica

$$1 - T(\omega) < 1 \text{ \%}.$$

5.5.2. Rotación de la polarización

La respuesta transversal debida al rompimiento en la simetría de inversión temporal da lugar a una rotación en la polarización de ondas reflejadas y transmitidas. La rotación en la polarización de la onda electromagnética reflejada se le conoce como efecto Kerr (K), mientras que la rotación en la polarización de la onda transmitida se le conoce como efecto Faraday (F). Tales rotaciones están definidas por

$$\tan 2\theta_{K/F}^{\varrho} = \frac{2\text{Re}\{\chi_{K/F}^{\varrho}\}}{1 - |\chi_{K/F}^{\varrho}|^2}, \quad (5.5.20)$$

donde $\varrho = p, s$ denota la polarización de la onda incidente, con $\chi_K^p = -r_{sp}/r_{pp}$, $\chi_K^s = r_{ps}/r_{ss}$ para la luz reflejada, y $\chi_F^p = t_{sp}/t_{pp}$, $\chi_F^s = -t_{ps}/t_{ss}$ para la luz transmitida. En la Fig. 5.12 se muestran varias curvas de las rotaciones de Kerr y Faraday para una onda electromagnética incidente s -polarizada a incidencia normal ($\theta_i = 0$) y varias posiciones del nivel de Fermi, tomando $\epsilon_1 = 1$ y $\epsilon_2 = 2$ (SiO_2). En las Figs. 5.12(a)-(c) se considera $\Delta^+ \neq 0$ y $\Delta^- = 0$, y en las Figs. 5.12(d)-(f) $\Delta^+ \neq \Delta^- \neq 0$. En cada uno de los escenarios se manifiestan frecuencias críticas anticipadas por la densidad conjunta de estados. Para tales frecuencias, las rotaciones de la polarización aumentan, alcanzando magnitudes $\sim 10^{-2} - 10^{-1}$ rad y $\sim 10^{-3} - 10^{-2}$ rad para los efectos Kerr y Faraday, respectivamente.

Como se comentó anteriormente, las componentes fuera de la diagonal del tensor de conductividad óptica del modelo en consideración satisfacen $|\sigma_{xy}/c|^2 \ll 1$. Consecuentemente, también se cumple $|\chi_{K/F}^{\alpha}| \ll 1$, por lo que la rotación de la polarización se puede aproximar como $\theta_{K/F}^{\varrho} \approx \text{Re}\{\chi_{K/F}^{\varrho}\}$. Además, considerando incidencia nor-

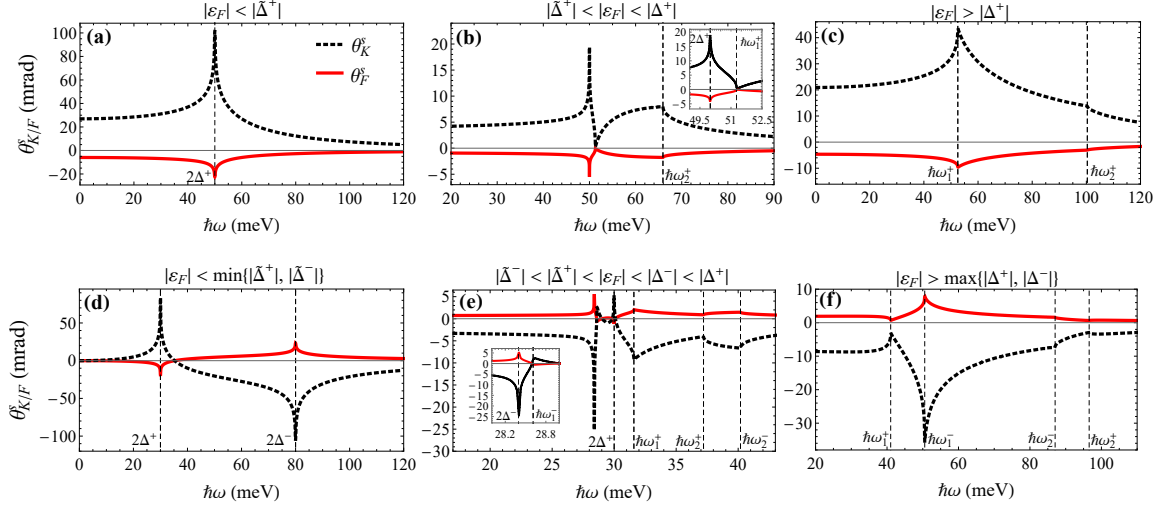


Figura 5.12: Rotaciones de Kerr y Faraday considerando una onda incidente s -polarizada ($\phi = \pi/2$) y normal al plano de incidencia ($\theta_i = 0$), tomando permitividades eléctricas $\epsilon_1 = 1$ y $\epsilon_2 = 2$ (SiO_2). En las Figs. (a)-(c) se considera $\Delta^+ = 25$ meV y $\Delta^- = 0$, para posiciones del nivel de Fermi como se indica. En la Fig. (d) se considera $\Delta^+ = 15$ meV y $\Delta^- = 40$ meV, para un nivel de Fermi en la brecha energética de ambos valles. En (e) se considera $\Delta^+ = 15$ meV y $\Delta^- = 14.2$ meV, con el nivel de Fermi en la brecha de energía indirecta de ambos valles. Finalmente en (f) se considera $\Delta^+ = 15$ meV y $\Delta^- = 25$ meV, con el nivel de Fermi por arriba de ambas zonas indirectas. En cada uno de los casos se manifiestan las frecuencias críticas en el comportamiento espectral de las rotaciones.

mal de radiación ($\theta_i = 0$), y constantes dieléctricas $\epsilon_1 = 1$ y $\epsilon_2 = 2$, se encuentra

$\theta_{K/F}^p \approx \theta_{K/F}^s$, donde

$$\theta_K^s(\omega) \approx -\frac{8\pi\text{Re}\{\sigma_{xy}(\omega)/c\}}{\epsilon_2 - 1 + 2\pi\alpha\sqrt{\epsilon_2}}, \quad (5.5.21)$$

$$\theta_F^s(\omega) \approx \frac{4\pi\text{Re}\{\sigma_{xy}(\omega)/c\}}{\sqrt{\epsilon_2} + 1 + \pi\alpha}, \quad (5.5.22)$$

donde se ha aproximado $\sigma_{ii}/c \approx \pi\sigma_0/4c = \alpha/4$. Evidentemente, los efectos Kerr y Faraday en la Fig. 5.12 tienen un comportamiento espectral similar al de la parte real de la respuesta Hall $\sigma_{xy}(\omega)$ (ver Fig. 5.6), tal como lo predicen los resultados anteriores.

Resulta interesante considerar las rotaciones de la polarización en Ecs. (5.5.21) y

(5.5.22) en el límite de frecuencia cero. Como se discutió anteriormente, la respuesta transversal estática a un campo eléctrico externo queda determinada por la conductividad Hall anómala (ver Ec. (5.4.1)), por lo que los ángulos de Kerr y Faraday a frecuencia cero están dados por las siguientes expresiones

$$\theta_K^s(0) \approx -\frac{8\pi \sigma^{AHE}/c}{\epsilon_2 - 1 + 2\pi\alpha\sqrt{\epsilon_2}}, \quad (5.5.23)$$

$$\theta_F^s(0) \approx \frac{4\pi \sigma^{AHE}/c}{\sqrt{\epsilon_2} + 1 + \pi\alpha}, \quad (5.5.24)$$

respectivamente. Además, en el mecanismo de rompimiento de simetría de valle propuesto por Hill *et al.* [63], un campo magnético periódico abre brechas de energías en ambos valles, las cuales se pueden controlar de manera independiente. Tal mecanismo permite cambiar el signo de Δ^- , $\theta_{K/F}^s(0) \propto \sigma^{VHE}$.

Capítulo 6

Conclusiones

En este trabajo se estudiaron los efectos de radiación electromagnética sobre las propiedades electrónicas de grafeno con distorsión Kekulé, considerando las texturas Kek-Y y Kek-O. El estudio de la estructura de bandas se llevó a cabo utilizando la teoría de Floquet, la cual es útil para describir sistemas cuánticos forzados dependientes del tiempo. Se consideró un campo electromagnético de alta frecuencia en donde los fotones se acoplan fuertemente con los portadores de carga para formar estados electrón-fotón. El cuasiespectro de energía que caracteriza a dichos estados se calculó partiendo de la ecuación de Dirac y haciendo uso del teorema de Floquet. Se encontró que una onda electromagnética circularmente polarizada de alta frecuencia es capaz de abrir y manipular brechas de energía. Se demostró que el cuasiespectro de grafeno con distorsión Kek-Y, el cual consiste en dos conos de Dirac con velocidades de Fermi diferentes en el centro de la zona de Brillouin, presenta dos brechas de energía de distinta magnitud en el punto de Dirac. Además, al considerar grafeno con distorsión Kek-O, el cual presenta un espectro de energía degenerado con brecha en el punto de Dirac, se mostró que luz circularmente polarizada tiende a cerrar

la brecha en uno de los conos, mientras que en el otro cono tiende a abrirla más, rompiendo así la degeneración. En el caso de incidencia de luz linealmente polarizada, se encontró que el cuasiespectro de energía se vuelve altamente anisotrópico, tal que las bandas se deforman perpendicular a la dirección de oscilación del campo eléctrico externo. Para grafeno con textura Kek-Y, las cuasienergías permanecen sin brecha. En cambio, al considerar grafeno con distorsión Kek-O, la degeneración en las cuasienergías se mantiene, pero la brecha de energía en el punto de Dirac disminuye en magnitud en comparación con el caso en ausencia de radiación. El estudio de las propiedades de transporte se profundizó en grafeno con textura Kek-Y bajo luz circularmente polarizada. Utilizando la ecuación linealizada de Boltzmann para la conductividad eléctrica, se calculó la conductividad como función de la irradiancia del campo externo, observando que el sistema se vuelve más aislante al incrementar la intensidad del campo externo, ya que las brechas de energía crecen en magnitud en función de la irradiancia.

Por otro lado, se estudiaron las propiedades ópticas de sistemas bidimensionales con conos de Dirac inclinados y anisotrópicos. Se introdujo un término de masa dependiente del valle en el hamiltoniano, el cual permite tener un control sobre las simetrías del sistema, reflejándose en la respuesta óptica. Un término de masa en el hamiltoniano del sistema da lugar a brechas de energía indirectas en la vecindad de los puntos de Dirac, con una magnitud menor a la brecha de energía nominal del sistema correspondiente sin inclinación. Esto abre una nueva posibilidad para la posición del nivel de Fermi entre ambas brechas de energía (“zona indirecta”), tal que para este escenario el espacio de momentos disponible para transiciones se redujo drásticamente. El estudio de las transiciones interbanda se llevó a cabo a través de cálculos de la densidad conjunta de estados y de la conductividad óptica

en la vecindad de los puntos de Dirac. Para una energía de Fermi en la zona indirecta se manifiestan tres frecuencias críticas en la respuesta óptica. En cambio, para una energía de Fermi en la brecha de energía, la densidad conjunta de estados presenta la usual dependencia lineal, tal como en grafeno, y para una energía de Fermi por arriba de la zona indirecta, ésta se comporta similar al caso del borofeno ortorrómbico $8-Pmmn$, debido a la inclinación de los conos de Dirac. La conductividad óptica se calculó utilizando la fórmula de Kubo dentro de la teoría de respuesta lineal considerando un campo eléctrico homogéneo dependiente del tiempo, y se estudiaron las partes reales de la contribución interbanda del tensor de conductividad. Estas cantidades permitieron estudiar la parte real de la conductividad longitudinal, en donde se manifiesta la anisotropía del espectro de energía. Además, gracias al control de las brechas de energía en cada valle de forma independiente, es posible romper la simetría de inversión temporal, dando lugar a una respuesta Hall finita dependiente de la frecuencia. A frecuencia cero, se estudiaron las conductividades Hall anómala y de valle en función de la energía de Fermi, presentando un comportamiento similar al caso del grafeno, pero con modificaciones para energías de Fermi en la zona indirecta debido a la naturaleza de las brechas de energía. Además, del problema de dispersión electromagnética, se estudió la opacidad óptica y las rotaciones de la polarización a incidencia normal de radiación para varias posiciones de la energía de Fermi, en donde se manifestaron las resonancias anticipadas por la densidad conjunta de estados. Se encontró una magnitud de la opacidad óptica alrededor de $\pi e^2/\hbar c \approx 2.3\%$, el cual es el valor conocido para el grafeno. Además, debido a la anisotropía en el espectro de energía, la opacidad óptica mostró una dependencia con la dirección de la polarización de la onda electromagnética incidente. Las rotaciones de Kerr y de Faraday alcanzaron valores alrededor de décimas de radianes en algunos casos, y su

comportamiento espectral es similar al de la parte real de la conductividad Hall.

En conclusión, el estudio de las propiedades electrónicas del grafeno con distorsión Kekulé sometido a radiación sugiere un método para determinar las diferentes texturas de Kekulé en grafeno. Además, el estudio de las propiedades ópticas de sistemas de Dirac anisotrópicos e inclinados permite explorar la anisotropía en el espectro, así como el rompimiento de distintas simetrías en el sistema, tal como el rompimiento de la simetría electrón-hueco debido a la inclinación de las bandas, o el rompimiento de la simetría de inversión temporal por términos de masa dependientes del valle.

Apéndice A

Ecuación de Dirac

El surgimiento de la mecánica cuántica en el siglo XX dio lugar a una revolución en la física, ya que el conocimiento de la física hasta antes de este acontecimiento era insuficiente para describir las propiedades más básicas de la materia. Schrödinger formuló la ecuación de onda (que ahora lleva su nombre) para una partícula cuántica, capaz de describir su dinámica bajo la acción de cierto potencial. Dicha ecuación proporcionó por primera vez una descripción ondulatoria de la materia.

Sin embargo, la ecuación de Schrödinger es incapaz de ofrecer una descripción correcta de la dinámica de partículas relativistas, esto es, partículas que se mueven a una velocidad cercana a la de la luz. Adicionalmente, el espín del electrón y su momento magnético son algunos de los fenómenos incapaces de explicar por la mecánica cuántica no relativista. En cambio, la mecánica cuántica relativista se encarga de dar respuesta a estas interrogantes, y la ecuación de Dirac provee una descripción exitosa.

Para incorporar la relatividad especial en la mecánica cuántica es natural partir

de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle, \quad (\text{A.0.1})$$

y utilizar el hamiltoniano clásico relativista

$$\mathcal{H} = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}, \quad (\text{A.0.2})$$

donde m es la masa de la partícula en consideración, p su momento y c la velocidad de la luz. De acuerdo a los postulados de la mecánica cuántica, el hamiltoniano cuántico análogo se recupera a partir de la sustitución $\mathcal{H} \rightarrow i\hbar \partial_t$ y $p \rightarrow -i\hbar \nabla$. Haciendo esta sustitución y multiplicando por la derecha por el vector de estado $|\psi(t)\rangle$, se obtiene

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} |\psi(t)\rangle. \quad (\text{A.0.3})$$

Haciendo una expansión en la raíz cuadrada

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = mc^2 \left(1 + \frac{p^2}{2m^2 c^2} - \frac{p^4}{8m^4 c^4} + \dots \right) |\psi(t)\rangle. \quad (\text{A.0.4})$$

Dado que en la base de coordenadas $p = -i\hbar \nabla$, la ecuación anterior es altamente indeseable para una teoría cuántica relativista, ya que la ecuación de onda para el vector de estado $|\psi(t)\rangle$ en el espacio de coordenadas tendría una derivada temporal y un infinito número de derivadas espaciales crecientes, dando lugar a una asimetría entre el tiempo y el espacio. Se procede entonces tomando el cuadrado de la ecuación (A.0.2), recuperando de esta forma

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} |\psi(t)\rangle = (c^2 p^2 + m^2 c^4) |\psi(t)\rangle. \quad (\text{A.0.5})$$

En la base de coordenadas

$$\left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \left(\frac{mc^2}{\hbar} \right)^2 \right] \psi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (\text{A.0.6})$$

La ecuación anterior es conocida como *ecuación de Klein-Gordon*. Aunque esta ecuación cuenta con la simetría deseada entre el espacio y el tiempo, desafortunadamente es incapaz de describir partículas con espín no nulo. Por ejemplo, se sabe que la manera correcta de describir al electrón es a través de una función de onda de dos componentes, conocida como espinor, pero de acuerdo a la teoría de Klein-Gordon, $\psi(\mathbf{r}, t)$ es un escalar. Además, es posible demostrar que la densidad de probabilidad $\rho = \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)$ no es una cantidad positiva definida, como consecuencia de la segunda derivada temporal en la ecuación de Klein-Gordon, lo cual esta en completo desacuerdo con la interpretación ortodoxa de la mecánica cuántica.

Dadas las dificultades con esta teoría, Paul Dirac, alrededor de 1928, propuso que la derivada tanto espacial como temporal en la ecuación de onda para describir la dinámica de una partícula relativista debería ser de primer orden, y propuso una ecuación de la siguiente forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = (-i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2) \psi(\mathbf{r}, t), \quad (\text{A.0.7})$$

donde se han introducido los elementos $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$ y β , los cuales deben determinarse de tal forma que el cuadrado de la cantidad entre paréntesis de como

resultado $c^2p^2 + m^2c^4$. Esta condición conduce a las siguientes propiedades

$$\begin{aligned}\alpha_i^2 = \beta^2 &= 1, & (i = x, y, z), \\ \{\alpha_i, \alpha_j\} &= 0, & (i \neq j), \\ \{\alpha_i, \beta\} &= 0,\end{aligned}\tag{A.0.8}$$

donde las llaves representan el anticonmutador. Evidentemente, dadas las condiciones anteriores, las cantidades α y β no pueden ser números, sino matrices. Es posible rescatar propiedades adicionales para dichas matrices. Primero, deben ser matrices hermitianas, ya que el hamiltoniano debe permanecer hermitiano al tratarse de un operador que representa una observable. Además, de la Ec. (A.0.8) se demuestra que las matrices deben tener eigenvalores ± 1 y traza nula. De estas dos últimas condiciones se sigue que la dimensión de las matrices debe ser par. Sin embargo, éstas no pueden ser de 2×2 , debido a que solo existen tres matrices que anticonmutan, mas no cuatro. Entonces, se escogen las siguientes matrices de 4×4 , originalmente propuestas por Paul Dirac

$$\alpha = \begin{pmatrix} -\boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I}_{2 \times 2} \\ \mathbb{I}_{2 \times 2} & 0 \end{pmatrix}, \tag{A.0.9}$$

donde $\mathbb{I}_{2 \times 2}$ es la matriz identidad de dimensión dos y $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, con σ_i las matrices de Pauli dadas por

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{A.0.10}$$

Entonces, considerando las matrices (A.0.9), la Ec. (A.0.7) es conocida como *ecuación*

de Dirac. Gracias a que la ecuación de Dirac es de primer orden en el espacio y en el tiempo, se demuestra que $\rho = \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)$ es positiva definida, por lo que la dificultad presente en la teoría de Klein-Gordon desaparece. Además, debido a que las matrices α_i y β son de dimensión cuatro, la función de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$ debe tener cuatro componentes, conocida como espinor de Lorentz.

Antes de la formulación de la teoría cuántica relativista, era de esperarse que el espinor asociado a una partícula fuera de dos componentes, describiendo así el grado de libertad de espín. Sin embargo, de acuerdo a la ecuación de Dirac, tal espinor es de cuatro componentes, dando lugar a un grado de libertad extra. Para analizar dicho grado de libertad adicional se considera el caso de una partícula libre. Se propone una solución de la forma

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - Et)/\hbar}, \quad (\text{A.0.11})$$

con ψ_0 a determinar. Si se sustituye esta propuesta en la ecuación de Dirac, se recuperan los siguientes valores para la energía $E = E_{\pm} = \pm\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}$. Además, si se asume que la velocidad de la partícula es mucho menor a c , se recupera para $E = E_+$

$$\psi_0^{+, \uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_0^{+, \downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.0.12})$$

y para $E = E_-$

$$\psi_0^{-, \uparrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_0^{-, \downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.0.13})$$

Las soluciones anteriores son eigenvectores de α_z , con eigenvalores $+1, -1, +1, -1$, respectivamente, por lo que se demuestra que la ecuación de Dirac es capaz de describir el espín de la partícula, algo imposible con la teoría de Klein-Gordon. Evidentemente existe un resultado inesperado, aquel con energía negativa E_- . Paul Dirac propuso que todos los estados con energía negativa están ocupados por electrones *inmersos* en el llamado mar de Dirac. Una transición de un electrón del estado E_- al estado E_+ se puede llevar a cabo al suministrar una energía mayor o igual a $2mc^2$, dejando un *hueco* en el mar de Dirac. Este hueco se comporta como un electrón con masa igual a la del electrón y con carga de igual magnitud pero signo opuesto, conocido también como positrón. Esto dio lugar al descubrimiento de la antimateria, lo cual se validó experimentalmente en 1932 por Carl Anderson.

Apéndice B

Partícula cargada en un campo electromagnético

Una partícula cargada de masa m y carga q sujeta a un campo electromagnético experimenta una energía potencial en función del vector potencial magnético $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ y del potencial electrostático $\Phi(\mathbf{r}, t)$ de la siguiente forma

$$U = q \Phi(\mathbf{r}, t) - q \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad (\text{B.0.1})$$

donde $\mathbf{r}$ es el vector de posición y $\dot{\mathbf{r}}$ la velocidad de la partícula. De las ecuaciones de Maxwell, los potenciales se relacionan con el campo eléctrico $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ y el campo magnético $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ de la siguiente manera

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla \Phi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad (\text{B.0.2})$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t). \quad (\text{B.0.3})$$

Las ecuaciones de movimiento de la partícula cargada se recuperan a partir del lagrangiano

$$\mathcal{L} = K - U = \frac{1}{2}m|\dot{\mathbf{r}}|^2 - q\Phi(\mathbf{r}, t) + q\dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad (\text{B.0.4})$$

donde $K = \frac{1}{2}m|\dot{\mathbf{r}}|^2$ es la energía cinética de la partícula. A partir de las ecuaciones de Lagrange,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i} = 0, \quad (\text{B.0.5})$$

donde x_i son las componentes del vector $\mathbf{r}$, se recupera la segunda ley de Newton para una partícula cargada bajo la acción de la fuerza de Lorentz

$$m\ddot{\mathbf{r}} = q\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + q\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t), \quad (\text{B.0.6})$$

donde $\ddot{\mathbf{r}}$ es la aceleración de la partícula. Ahora, para explorar el mismo problema desde el punto de vista de la mecánica de Hamilton, se recurre a la definición del momento canónico

$$\mathbf{p} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = m\dot{\mathbf{r}} + q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad (\text{B.0.7})$$

y al hamiltoniano del sistema

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^3 p_i \dot{x}_i - \mathcal{L}, \quad (\text{B.0.8})$$

donde p_i son las componentes del momento canónico. Utilizando las Ecs. (B.0.4) y (B.0.7), el hamiltoniano anterior toma la siguiente forma en función del momento canónico

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}|\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)|^2 + q\Phi(\mathbf{r}, t). \quad (\text{B.0.9})$$

Gracias a que las ecuaciones de Maxwell preservan la simetría de norma (gauge), es posible escoger un vector potencial magnético tal que en otra representación $\Phi(\mathbf{r}, t) = 0$. Dado esto, el hamiltoniano de una partícula cargada bajo la acción de una onda electromagnética esta dado por

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} |\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)|^2. \quad (\text{B.0.10})$$

Comparando con el hamiltoniano de una partícula cargada libre $\mathcal{H}_0 = \frac{|\mathbf{p}|^2}{2m}$, el resultado anterior indica que es posible introducir un campo electromagnético al hamiltoniano a través de la sustitución $m\dot{\mathbf{r}} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, donde $m\dot{\mathbf{r}}$ es el momento cinético de la partícula.

Operador de corriente eléctrica

Para encontrar una expresión para el operador cuántico de corriente de una partícula cargada sujeta a un campo electromagnético externo, se parte del hamiltoniano (B.0.10), donde ahora, de acuerdo a los postulados de la mecánica cuántica, el momento se sustituye por el operador de momento, esto es, $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$. Entonces, desarrollando el cuadrado en Ec. (B.0.10) se recupera

$$\begin{aligned} H(t) &\approx \frac{|\mathbf{p}|^2}{2m} - \frac{e}{2m} [\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{p}] \\ &= \frac{|\mathbf{p}|^2}{2m} - \frac{e}{m} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (\text{B.0.11})$$

en donde se ha despreciado el término cuadrático en $\mathbf{A}$, ya que por lo general se considera que la magnitud del campo externo es pequeña. Además, en el último paso se tomó en cuenta que $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, por lo que se demuestra que $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$. Ahora,

se considera la ecuación de Schrödinger para el hamiltoniano (B.0.11), esto es

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + i \frac{e\hbar}{m} \nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right] \psi(\mathbf{r}, t). \quad (\text{B.0.12})$$

Multiplicando la ecuación anterior por la función de onda conjugada $\psi^*(\mathbf{r}, t)$, y conjugando la ecuación resultante, se recuperan las siguientes dos ecuaciones

$$i\hbar \psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r}, t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + i \frac{e\hbar}{m} \nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right] \psi(\mathbf{r}, t), \quad (\text{B.0.13})$$

$$-i\hbar \psi(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - i \frac{e\hbar}{m} \nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right] \psi^*(\mathbf{r}, t). \quad (\text{B.0.14})$$

Restando las ecuaciones anteriores se recupera la siguiente ecuación

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\frac{\hbar}{m} \text{Im} \{ \psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) \} - \frac{e}{m} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \rho \right] = 0, \quad (\text{B.0.15})$$

donde $\rho = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ es la densidad de probabilidad. De la ecuación anterior, es posible rescatar una expresión para el operador de densidad de corriente $\mathbf{J}$ comparando con la ecuación de continuidad en electrodinámica $\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0$. Dado esto, se observa que el operador de corriente esta dado por la siguiente expresión

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \{ \psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) \} - \frac{e}{m} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \rho. \quad (\text{B.0.16})$$

Además, considerando que los portadores de carga son electrones con carga eléctrica e , el operador de corriente *eléctrica* queda definido como $\mathbf{J}^e = e \mathbf{J}$. Otro aspecto importante es que el operador $\mathbf{J}^e$ se puede escribir como la suma de dos contribuciones distintas

$$\mathbf{J}^e(\mathbf{r}, t) = \mathbf{J}^P(\mathbf{r}, t) + \mathbf{J}^D(\mathbf{r}, t), \quad (\text{B.0.17})$$

donde el primer término del lado derecho es la contribución paramagnética, y el segundo término la contribución diamagnética, esto es,

$$\text{Paramagnética:} \quad \mathbf{J}^{\text{P}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar e}{m} \text{Im} \{ \psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) \}, \quad (\text{B.0.18})$$

$$\text{Diamagnética:} \quad \mathbf{J}^{\text{D}}(\mathbf{r}, t) = -\frac{e^2}{m} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \rho. \quad (\text{B.0.19})$$

La contribución paramagnética es la usual corriente de probabilidad en mecánica cuántica, y la contribución diamagnética aparece como consecuencia del campo electromagnético externo.

Apéndice C

Teoría de Floquet

Dentro del estudio de sistemas cuánticos descritos por un hamiltoniano periódico dependiente del tiempo, la teoría de Floquet ofrece un método para el cálculo del espectro de energía y los estados cuánticos. Esta teoría se basa principalmente en el teorema de Floquet, el cual se enuncia como sigue:

Sea $L(t)$ un operador lineal periódico en t con periodo T , esto es, $L(t+T) = L(t)$. La ecuación diferencial $\dot{x}(t) = L(t)x(t)$ tiene soluciones del tipo

$$x(t) = \Phi(t) e^{Bt}, \quad (\text{C.0.1})$$

donde $\Phi(t)$ es una función periódica con periodo T , conocida como modo de Floquet, y B es conocido como exponente característico de Floquet.

Para aplicar el teorema anterior a la teoría cuántica, se considera un sistema cuántico sometido a una perturbación externa dependiente del tiempo, tal que queda

descrito por un hamiltoniano periódico en el tiempo,

$$H(t) = H(t + T), \quad (\text{C.0.2})$$

donde $T = 2\pi/\Omega$ es el periodo de la perturbación y Ω su frecuencia. La ecuación de Schrödinger para este sistema tiene la siguiente forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle. \quad (\text{C.0.3})$$

La ecuación anterior sigue hacer uso del teorema de Floquet para describir la dinámica de los estados $|\psi(t)\rangle$. Entonces, se proponen soluciones a la ecuación de Schrödinger de la forma

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\varepsilon t/\hbar} |\Phi(t)\rangle, \quad (\text{C.0.4})$$

donde $|\Phi(t)\rangle$ es el modo de Floquet, el cuál es una función periódica en el tiempo con periodo T , esto es,

$$|\Phi(t)\rangle = |\Phi(t + T)\rangle. \quad (\text{C.0.5})$$

Dentro de la teoría cuántica, el exponente característico ε es conocido como *cuasienergía*. Sustituyendo ahora la Ec. (C.0.4) en la Ec. (C.0.3), se recupera la siguiente ecuación de eigenvalor para la cuasienergía

$$\left(H(t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) |\Phi(t)\rangle = \varepsilon |\Phi(t)\rangle. \quad (\text{C.0.6})$$

Una consecuencia importante del teorema de Floquet aplicado a sistemas cuánticos bajo la acción de una perturbación periódica en el tiempo, es que la cuasienergía ε es única hasta múltiplos de $\hbar\Omega$. Para demostrar esto, se considera el producto

$e^{in\Omega t}e^{-in\Omega t}$ en la Ec. (C.0.6)

$$\left(H(t) - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right) e^{in\Omega t}e^{-in\Omega t} |\Phi(t)\rangle = \varepsilon e^{in\Omega t}e^{-in\Omega t} |\Phi(t)\rangle, \quad (\text{C.0.7})$$

con n a determinar. La expresión anterior da lugar a lo siguiente

$$\left(H(t) - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right) (e^{in\Omega t} |\Phi(t)\rangle) = (\varepsilon + n\hbar\Omega)(e^{in\Omega t} |\Phi(t)\rangle). \quad (\text{C.0.8})$$

De la ecuación anterior se observa que al modo de Floquet $|\Phi_n(t)\rangle = e^{in\Omega t} |\Phi(t)\rangle$ le corresponde la cuasienergía $\varepsilon_n = \varepsilon + n\hbar\Omega$. Además, dado que el modo de Floquet $|\Phi_n(t)\rangle$ debe ser una función periódica en el tiempo con periodo $T = 2\pi/\Omega$, n debe ser un número entero. Por otro lado, el estado de Floquet (C.0.4) permanece invariante, esto es,

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i(\varepsilon+n\hbar\Omega)t/\hbar} (e^{in\Omega t} |\Phi(t)\rangle) = e^{-i\varepsilon t/\hbar} |\Phi(t)\rangle \quad (\text{C.0.9})$$

Dado lo anterior, los modos de Floquet $|\Phi(t)\rangle$ y $e^{in\Omega t} |\Phi(t)\rangle$, y las respectivas cuasienergías, ε y $\varepsilon + n\hbar\Omega$, son físicamente equivalentes, por lo que las cuasienergías $\{\varepsilon_n\}$ pueden ser mapeadas a la primera zona de Brillouin, $-\hbar\Omega/2 \leq \varepsilon < \hbar\Omega/2$, tal que es suficiente considerar los estados en esa región para describir el sistema cuántico.

Bibliografía

- [1] Phong A. Tran, Lijie Zhang, and Thomas J. Webster. Carbon nanofibers and carbon nanotubes in regenerative medicine. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 61(12):1097–1114, 2009. Nanofibers in Regenerative Medicine and Drug Delivery.
- [2] Phaedon Avouris, Zhihong Chen, and Vasili Perebeinos. Carbon-based electronics. *Nanoscience and Technology: A Collection of Reviews from Nature Journals*, pages 174–184, 2010.
- [3] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 81:109–162, Jan 2009.
- [4] Andreas Hirsch. The era of carbon allotropes. *Nature materials*, 9(11):868–871, 2010.
- [5] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306(5696):666–669, 2004.
- [6] Melinda Y. Han, Barbaros Özyilmaz, Yuanbo Zhang, and Philip Kim. Energy band-gap engineering of graphene nanoribbons. *Phys. Rev. Lett.*, 98:206805, May 2007.

- [7] Gonzalo Usaj, P. M. Perez-Piskunow, L. E. F. Foa Torres, and C. A. Balseiro. Irradiated graphene as a tunable Floquet topological insulator. *Phys. Rev. B*, 90:115423, Sep 2014.
- [8] T.O. Wehling, A.M. Black-Schaffer, and A.V. Balatsky. Dirac materials. *Advances in Physics*, 63(1):1–76, 2014.
- [9] A. Raoux, M. Morigi, J.-N. Fuchs, F. Piéchon, and G. Montambaux. From dia- to paramagnetic orbital susceptibility of massless fermions. *Phys. Rev. Lett.*, 112:026402, Jan 2014.
- [10] J. D. Malcolm and E. J. Nicol. Magneto-optics of massless Kane fermions: Role of the flat band and unusual Berry phase. *Phys. Rev. B*, 92:035118, Jul 2015.
- [11] Fa Wang and Ying Ran. Nearly flat band with Chern number $c = 2$ on the dice lattice. *Phys. Rev. B*, 84:241103, Dec 2011.
- [12] Matteo Rizzi, Vittorio Cataudella, and Rosario Fazio. Phase diagram of the Bose-Hubbard model with $\mathcal{T}_3$ symmetry. *Phys. Rev. B*, 73:144511, Apr 2006.
- [13] F Piéchon, JN Fuchs, A Raoux, and G Montambaux. Tunable orbital susceptibility in α - t_3 tight-binding models. In *Journal of Physics: Conference Series*, volume 603, page 012001. IOP Publishing, 2015.
- [14] E. Illes and E. J. Nicol. Klein tunneling in the α - T_3 model. *Phys. Rev. B*, 95:235432, Jun 2017.
- [15] E. Illes, J. P. Carbotte, and E. J. Nicol. Hall quantization and optical conductivity evolution with variable Berry phase in the α - T_3 model. *Phys. Rev. B*, 92:245410, Dec 2015.

- [16] Christopher Gutiérrez, Cheol-Joo Kim, Lola Brown, Theanne Schiros, Dennis Nordlund, Edward B Lochocki, Kyle M Shen, Jiwoong Park, and Abhay N Pasupathy. Imaging chiral symmetry breaking from Kekulé bond order in graphene. *Nature Physics*, 12(10):950–958, 2016.
- [17] O V Gamayun, V P Ostroukh, N V Gnezdilov, Í Adagideli, and C W J Beenakker. Valley-momentum locking in a graphene superlattice with Y-shaped Kekulé bond texture. *New Journal of Physics*, 20(2):023016, feb 2018.
- [18] Changhua Bao, Hongyun Zhang, Teng Zhang, Xi Wu, Laipeng Luo, Shaohua Zhou, Qian Li, Yanhui Hou, Wei Yao, Liwei Liu, Pu Yu, Jia Li, Wenhui Duan, Hong Yao, Yeliang Wang, and Shuyun Zhou. Experimental evidence of chiral symmetry breaking in kekulé-ordered graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 126:206804, May 2021.
- [19] Daejin Eom and Ja-Yong Koo. Direct measurement of strain-driven Kekulé distortion in graphene and its electronic properties. *Nanoscale*, 12:19604–19608, 2020.
- [20] Elias Andrade, Ramon Carrillo-Bastos, and Gerardo G. Naumis. Valley engineering by strain in Kekulé-distorted graphene. *Phys. Rev. B*, 99:035411, Jan 2019.
- [21] Saúl A. Herrera and Gerardo G. Naumis. Electronic and optical conductivity of Kekulé-patterned graphene: Intravalley and intervalley transport. *Phys. Rev. B*, 101:205413, May 2020.
- [22] Elias Andrade, Ramon Carrillo-Bastos, Pierre A. Pantaleón, and Francisco Mi-

- reles. Resonant transport in Kekulé-distorted graphene nanoribbons. *Journal of Applied Physics*, 127(5):054304, 2020.
- [23] Juan Juan Wang, S. Liu, J. Wang, and Jun-Feng Liu. Valley-coupled transport in graphene with Y-shaped Kekulé structure. *Phys. Rev. B*, 98:195436, Nov 2018.
- [24] Qing-Ping Wu, Lu-Lu Chang, Yu-Zeng Li, Zheng-Fang Liu, and Xian-Bo Xiao. Electric-controlled valley pseudomagnetoresistance in graphene with Y-shaped Kekulé lattice distortion. *Nanoscale research letters*, 15(1):1–6, 2020.
- [25] Elias Andrade, Gerardo G Naumis, and Ramon Carrillo-Bastos. Electronic spectrum of Kekule patterned graphene considering second neighbor-interactions. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2021.
- [26] Xiang-Feng Zhou, Xiao Dong, Artem R. Oganov, Qiang Zhu, Yongjun Tian, and Hui-Tian Wang. Semimetallic two-dimensional boron allotrope with massless Dirac fermions. *Phys. Rev. Lett.*, 112:085502, Feb 2014.
- [27] A. D. Zabolotskiy and Yu. E. Lozovik. Strain-induced pseudomagnetic field in the Dirac semimetal borophene. *Phys. Rev. B*, 94:165403, Oct 2016.
- [28] M. O. Goerbig, J.-N. Fuchs, G. Montambaux, and F. Piéchon. Tilted anisotropic Dirac cones in quinoid-type graphene and α -(BEDT-TTF)₂I₃. *Phys. Rev. B*, 78:045415, Jul 2008.
- [29] Akito Kobayashi, Shinya Katayama, Yoshikazu Suzumura, and Hidetoshi Fukuyama. Massless fermions in organic conductor. *Journal of the Physical Society of Japan*, 76(3):034711, 2007.

- [30] Koji Kajita. Massless Dirac fermions realized in an organic crystal α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$. *JPSJ News and Comments*, 3:05, 2006.
- [31] Kenta Yoshimura, Mitsuyuki Sato, and Toshihito Osada. Experimental confirmation of massive Dirac fermions in weak charge-ordering state in α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$. *Journal of the Physical Society of Japan*, 90(3):033701, 2021.
- [32] Xiaofeng Qian, Junwei Liu, Liang Fu, and Ju Li. Quantum spin Hall effect in two-dimensional transition metal dichalcogenides. *Science*, 346(6215):1344–1347, 2014.
- [33] Feipeng Zheng, Chaoyi Cai, Shaofeng Ge, Xuefeng Zhang, Xin Liu, Hong Lu, Yudao Zhang, Jun Qiu, Takashi Taniguchi, Kenji Watanabe, Shuang Jia, Jingshan Qi, Jian-Hao Chen, Dong Sun, and Ji Feng. On the quantum spin Hall gap of monolayer 1T'-WTe $_2$. *Advanced Materials*, 28(24):4845–4851, 2016.
- [34] Hong-Yan Lu, Armindo S. Cuamba, Shih-Yang Lin, Lei Hao, Rui Wang, Hai Li, YuanYuan Zhao, and C. S. Ting. Tilted anisotropic Dirac cones in partially hydrogenated graphene. *Phys. Rev. B*, 94:195423, Nov 2016.
- [35] Zhao-Kun Yang, Jing-Rong Wang, and Guo-Zhu Liu. Effects of Dirac cone tilt in a two-dimensional Dirac semimetal. *Phys. Rev. B*, 98:195123, Nov 2018.
- [36] Judit Sári, Csaba Tóke, and Mark O. Goerbig. Magnetoplasmons of the tilted anisotropic Dirac cone material α -(BEDT – TTF) $_2$ I $_3$. *Phys. Rev. B*, 90:155446, Oct 2014.
- [37] Krishanu Sadhukhan and Amit Agarwal. Anisotropic plasmons, Friedel oscillations, and screening in 8-*Pmmn* borophene. *Phys. Rev. B*, 96:035410, Jul 2017.

- [38] Sonu Verma, Alestin Mawrie, and Tarun Kanti Ghosh. Effect of electron-hole asymmetry on optical conductivity in 8 – $Pmmn$ borophene. *Phys. Rev. B*, 96:155418, Oct 2017.
- [39] Takashi Oka and Sota Kitamura. Floquet engineering of quantum materials. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 10(1):387–408, 2019.
- [40] Kristinn Kristinsson, Oleg V Kibis, Skender Morina, and Ivan A Shelykh. Control of electronic transport in graphene by electromagnetic dressing. *Scientific reports*, 6:20082, 2016.
- [41] S. V. Syzranov, Ya. I. Rodionov, K. I. Kugel, and F. Nori. Strongly anisotropic Dirac quasiparticles in irradiated graphene. *Phys. Rev. B*, 88:241112, Dec 2013.
- [42] F. J. López-Rodríguez and G. G. Naumis. Analytic solution for electrons and holes in graphene under electromagnetic waves: Gap appearance and nonlinear effects. *Phys. Rev. B*, 78:201406, Nov 2008.
- [43] Takashi Oka and Hideo Aoki. Photovoltaic Hall effect in graphene. *Phys. Rev. B*, 79:081406, Feb 2009.
- [44] O. V. Kibis, K. Dini, I. V. Iorsh, and I. A. Shelykh. All-optical band engineering of gapped Dirac materials. *Phys. Rev. B*, 95:125401, Mar 2017.
- [45] Bashab Dey and Tarun Kanti Ghosh. Floquet topological phase transition in the $\alpha - \mathcal{T}_3$ lattice. *Phys. Rev. B*, 99:205429, May 2019.
- [46] Andrii Iurov, Godfrey Gumbs, and Danhong Huang. Peculiar electronic states, symmetries, and Berry phases in irradiated $\alpha - \mathcal{T}_3$ materials. *Phys. Rev. B*, 99:205135, May 2019.

- [47] Bashab Dey and Tarun Kanti Ghosh. Photoinduced valley and electron-hole symmetry breaking in $\alpha - T_3$ lattice: The role of a variable Berry phase. *Phys. Rev. B*, 98:075422, Aug 2018.
- [48] Abdiel E. Champo and Gerardo G. Naumis. Metal-insulator transition in 8 – $Pmmn$ borophene under normal incidence of electromagnetic radiation. *Phys. Rev. B*, 99:035415, Jan 2019.
- [49] V. G. Ibarra-Sierra, J. C. Sandoval-Santana, A. Kunold, and Gerardo G. Naumis. Dynamical band gap tuning in anisotropic tilted Dirac semimetals by intense elliptically polarized normal illumination and its application to 8– $Pmmn$ borophene. *Phys. Rev. B*, 100:125302, Sep 2019.
- [50] J. C. Sandoval-Santana, V. G. Ibarra-Sierra, A. Kunold, and Gerardo G. Naumis. Floquet spectrum for anisotropic and tilted Dirac materials under linearly polarized light at all field intensities. *Journal of Applied Physics*, 127(23):234301, 2020.
- [51] A. Kunold, J. C. Sandoval-Santana, V. G. Ibarra-Sierra, and Gerardo G. Naumis. Floquet spectrum and electronic transitions of tilted anisotropic Dirac materials under electromagnetic radiation: Monodromy matrix approach. *Phys. Rev. B*, 102:045134, Jul 2020.
- [52] N. M. R. Peres. Colloquium: The transport properties of graphene: An introduction. *Rev. Mod. Phys.*, 82:2673–2700, Sep 2010.
- [53] Jian-Hao Chen, Chaun Jang, Shudong Xiao, Masa Ishigami, and Michael S Fuhrer. Intrinsic and extrinsic performance limits of graphene devices on SiO_2 . *Nature nanotechnology*, 3(4):206–209, 2008.

- [54] R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres, and A. K. Geim. Fine structure constant defines visual transparency of graphene. *Science*, 320(5881):1308–1308, 2008.
- [55] Saúl A. Herrera and Gerardo G. Naumis. Kubo conductivity for anisotropic tilted dirac semimetals and its application to 8-*pmmn* borophene: Role of frequency, temperature, and scattering limits. *Phys. Rev. B*, 100:195420, Nov 2019.
- [56] John R Schaibley, Hongyi Yu, Genevieve Clark, Pasqual Rivera, Jason S Ross, Kyle L Seyler, Wang Yao, and Xiaodong Xu. Valleytronics in 2D materials. *Nature Reviews Materials*, 1(11):1–15, 2016.
- [57] Y. J. Zhang, T. Oka, R. Suzuki, J. T. Ye, and Y. Iwasa. Electrically switchable chiral light-emitting transistor. *Science*, 344(6185):725–728, 2014.
- [58] R. V. Gorbachev, J. C. W. Song, G. L. Yu, A. V. Kretinin, F. Withers, Y. Cao, A. Mishchenko, I. V. Grigorieva, K. S. Novoselov, L. S. Levitov, and A. K. Geim. Detecting topological currents in graphene superlattices. *Science*, 346(6208):448–451, 2014.
- [59] K. F. Mak, K. L. McGill, J. Park, and P. L. McEuen. The valley Hall effect in MoS₂ transistors. *Science*, 344(6191):1489–1492, 2014.
- [60] Yuanbo Zhang, Yan-Wen Tan, Horst L Stormer, and Philip Kim. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry’s phase in graphene. *Nature*, 438(7065):201–204, 2005.
- [61] Kostya S Novoselov, Edward McCann, SV Morozov, Vladimir I Fal’ko, MI Katsnelson, U Zeitler, D Jiang, F Schedin, and AK Geim. Unconventional quantum

- Hall effect and Berry's phase of 2π in bilayer graphene. *Nature physics*, 2(3):177–180, 2006.
- [62] Kostya S Novoselov, Andre K Geim, Sergei V Morozov, D Jiang, Y- Zhang, Sergey V Dubonos, Irina V Grigorieva, and Alexandr A Firsov. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306(5696):666–669, 2004.
- [63] Antonio Hill, Andreas Sinner, and Klaus Ziegler. Valley symmetry breaking and gap tuning in graphene by spin doping. *New Journal of Physics*, 13(3):035023, mar 2011.
- [64] D. C. Elias, R. R. Nair, T. M. G. Mohiuddin, S. V. Morozov, P. Blake, M. P. Halsall, A. C. Ferrari, D. W. Boukhvalov, M. I. Katsnelson, A. K. Geim, and K. S. Novoselov. Control of graphene's properties by reversible hydrogenation: Evidence for graphane. *Science*, 323(5914):610–613, 2009.
- [65] Rahul Nandkishore and Leonid Levitov. Polar Kerr effect and time reversal symmetry breaking in bilayer graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 107:097402, Aug 2011.
- [66] R Shimano, G Yumoto, JY Yoo, R Matsunaga, S Tanabe, H Hibino, T Morimoto, and H Aoki. Quantum Faraday and Kerr rotations in graphene. *Nature communications*, 4(1):1–6, 2013.
- [67] Wang-Kong Tse and A. H. MacDonald. Giant magneto-optical Kerr effect and universal Faraday effect in thin-film topological insulators. *Phys. Rev. Lett.*, 105:057401, Jul 2010.
- [68] Iris Crassee, Julien Levallois, Andrew L Walter, Markus Ostler, Aaron Bostwick, Eli Rotenberg, Thomas Seyller, Dirk Van Der Marel, and Alexey B Kuzmen-

- ko. Giant Faraday rotation in single-and multilayer graphene. *Nature Physics*, 7(1):48–51, 2011.
- [69] Luis E F Foa Torres, Stephan Roche, and Jean-Christophe Charlier. *Introduction to graphene-based nanomaterials: from electronic structure to quantum transport*. Cambridge University Press, 2020.
- [70] Kostya S Novoselov, Andre K Geim, Sergei Vladimirovich Morozov, Dingde Jiang, Michail I Katsnelson, Irina V Grigorieva, S V Dubonos, and A A Firsov. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature*, 438(7065):197–200, 2005.
- [71] V.V. Cheianov, V.I. Fal’ko, O. Syljuåsen, and B.L. Altshuler. Hidden Kekulé ordering of adatoms on graphene. *Solid State Communications*, 149(37):1499–1501, 2009.
- [72] Claudio Chamon. Solitons in carbon nanotubes. *Phys. Rev. B*, 62:2806–2812, Jul 2000.
- [73] Andrew J. Mannix, Xiang-Feng Zhou, Brian Kiraly, Joshua D. Wood, Diego Alducin, Benjamin D. Myers, Xiaolong Liu, Brandon L. Fisher, Ulises Santiago, Jeffrey R. Guest, Miguel Jose Yacaman, Arturo Ponce, Artem R. Oganov, Mark C. Hersam, and Nathan P. Guisinger. Synthesis of borophenes: Anisotropic, two-dimensional boron polymorphs. *Science*, 350(6267):1513–1516, 2015.
- [74] Baojie Feng, Jin Zhang, Qing Zhong, Wenbin Li, Shuai Li, Hui Li, Peng Cheng, Sheng Meng, Lan Chen, and Kehui Wu. Experimental realization of two-dimensional boron sheets. *Nature chemistry*, 8(6):563–568, 2016.

- [75] Qiucheng Li, Venkata Surya Chaitanya Kolluru, Matthew S. Rahn, Eric Schwenker, Shaowei Li, Richard G. Hennig, Pierre Darancet, Maria K. Y. Chan, and Mark C. Hersam. Synthesis of borophane polymorphs through hydrogenation of borophene. *Science*, 371(6534):1143–1148, 2021.
- [76] MI Katsnelson, KS Novoselov, and AK Geim. Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene. *Nature physics*, 2(9):620–625, 2006.
- [77] B Andrei Bernevig. *Topological insulators and topological superconductors*. Princeton university press, 2013.
- [78] Liuyan Zhao, Rui He, Kwang Taeg Rim, Theanne Schiros, Keun Soo Kim, Hui Zhou, Christopher Gutiérrez, S. P. Chockalingam, Carlos J. Arguello, Lucia Pálová, Dennis Nordlund, Mark S. Hybertsen, David R. Reichman, Tony F. Heinz, Philip Kim, Aron Pinczuk, George W. Flynn, and Abhay N. Pasupathy. Visualizing individual nitrogen dopants in monolayer graphene. *Science*, 333(6045):999–1003, 2011.
- [79] S Yi Zhou, G-H Gweon, AV Fedorov, de First, PN, WA De Heer, D-H Lee, F Guinea, AH Castro Neto, and A Lanzara. Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene. *Nature materials*, 6(10):770–775, 2007.
- [80] B. Hunt, J. D. Sanchez-Yamagishi, A. F. Young, M. Yankowitz, B. J. LeRoy, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Moon, M. Koshino, P. Jarillo-Herrero, and R. C. Ashoori. Massive Dirac fermions and Hofstadter butterfly in a Van der Waals heterostructure. *Science*, 340(6139):1427–1430, 2013.
- [81] F Duncan M Haldane. Model for a quantum Hall effect without Landau levels:

- Condensed-matter realization of the “parity anomaly”. *Physical Review Letters*, 61(18):2015, 1988.
- [82] Henrik Bruus and Karsten Flensberg. *Many-body quantum theory in condensed matter physics: An introduction*. Oxford university press, 2004.
- [83] Ryogo Kubo. Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. General theory and simple applications to magnetic and conduction problems. *Journal of the Physical Society of Japan*, 12(6):570–586, 1957.
- [84] Gerald D Mahan. *Many-particle physics*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [85] Yu A Il’Inskii and Leonid Veniaminovich Keldysh. *Electromagnetic response of material media*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [86] Yongrui Wang, Mikhail Tokman, and Alexey Belyanin. Second-order nonlinear optical response of graphene. *Phys. Rev. B*, 94:195442, Nov 2016.
- [87] Andreas W. W. Ludwig, Matthew P. A. Fisher, R. Shankar, and G. Grinstein. Integer quantum hall transition: An alternative approach and exact results. *Phys. Rev. B*, 50:7526–7552, Sep 1994.
- [88] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.*, 49:405–408, Aug 1982.
- [89] Michael Victor Berry. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 392(1802):45–57, 1984.

- [90] Naoto Nagaosa, Jairo Sinova, Shigeki Onoda, A. H. MacDonald, and N. P. Ong. Anomalous Hall effect. *Rev. Mod. Phys.*, 82:1539–1592, May 2010.
- [91] Biswaranjan R Nag. *Electron transport in compound semiconductors*, volume 11. Springer Science & Business Media, 2012.
- [92] Charles Kittel. *Introduction to solid state physics*. 1976.
- [93] R S Sorbello. On the anisotropic relaxation time. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 4(4):503–512, apr 1974.
- [94] R S Sorbello. Anisotropic relaxation times for impurity scattering on the Fermi surface. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 4(10):1665–1683, oct 1974.
- [95] D Yudin, O V Kibis, and I A Shelykh. Optically tunable spin transport on the surface of a topological insulator. *New Journal of Physics*, 18(10):103014, oct 2016.
- [96] Lev Davidovich Landau and Evgenii Mikhailovich Lifshitz. *Quantum mechanics: Non-relativistic theory*, volume 3. Elsevier, 2013.
- [97] M. A. Mojarro, V. G. Ibarra-Sierra, J. C. Sandoval-Santana, R. Carrillo-Bastos, and Gerardo G. Naumis. Dynamical Floquet spectrum of Kekulé-distorted graphene under normal incidence of electromagnetic radiation. *Phys. Rev. B*, 102:165301, Oct 2020.
- [98] Priyadarshini Kapri, Bashab Dey, and Tarun Kanti Ghosh. Valley caloritronics in a photodriven heterojunction of Dirac materials. *Phys. Rev. B*, 102:045417, Jul 2020.

- [99] M. A. Mojarro, R. Carrillo-Bastos, and Jesús A. Maytorena. Optical properties of massive anisotropic tilted Dirac systems. *Phys. Rev. B*, 103:165415, Apr 2021.