

DISTORSIONES EN LA RED PARA NANOCINTAS DE GRAFENO ARMCHAIR. ¿ABREN O NO UN GAP?

C.G. Beneventano^{a,c}, I. V. Fialkovsky^b, M. Nieto^{a,c}, E. M. Santagelo^c

^aDepartamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Facultad de Ingeniería- UNLP.

^bCMCC- Universidade Federal do ABC, Santo André, S. P. Brasil

^cIPLP, CONICET –CCT- Departamento de Física Facultad de Ciencias Exactas –UNLP.

E-mail: mariela.nieto@ing.unlp.edu.ar

INTRODUCCIÓN

Desde su sintetización en el laboratorio en 2004 el grafeno ha sido ampliamente estudiado. Sus propiedades particulares nos han enseñado nueva Física, como por ejemplo el Efecto Hall inusual, el electrón Zitterbewegung, y muchos otros han sido testeados en el laboratorio[1,2].

Se sabe que este material presenta un gap en su espectro de energías, por lo cual la creación de mecanismos para la apertura de un gap resulta un desafío para la ciencia actual, es éste el contexto en el que tiene protagonismo las nanocintas de grafeno (GNRs). Las nanocintas son usualmente nombradas, de acuerdo a la forma de su borde, como zigzag o armchair (AGNR).

En este trabajo estudiamos, en el límite del continuo, la familia de AGNRs caracterizadas por la presencia de $N = 3p + 2, p \in \mathbf{Z}$ átomos presentes a lo ancho de la cinta. Encontramos el espectro de energías de tal cinta y analizamos la posibilidad de abrir un gap y la existencia de estados exponencialmente localizados en el borde bajo diferentes distorsiones (i.e. términos de masa). Contrariamente a lo establecido en la literatura [3,4], mostramos que en algunos casos, las AGNRs metálicas poseen estados concentrados en el borde cuya existencia depende de los términos de masa presentes en el sistema. Un caso particular resulta de considerar una distorsión completa de Kekulé [5], para la cual calculamos la densidad de carga y la conductividad longitudinal usando las técnicas de la Teoría Cuántica de Campos (TCC) aplicadas al grafeno[6,7]. La contribución de estos modos de borde fue calculada separadamente, de lo cual se puede resaltar que la presencia de estos modos puede ser testeada en el laboratorio.

Este trabajo está organizado como sigue. La sección II contiene las bases de AGNRs sin distorsión. En la sección III presentamos, siguiendo la referencia [8], los posibles términos de masa compatibles con el Hamiltoniano, y manifestamos la existencia de una simetría que protege los modos sin gap. En particular consideramos una distorsión completa de Kekulé, destacando la presencia de estos modos de borde en la densidad de carga y la conductividad longitudinal. A menos que indiquemos lo contrario, trabajaremos

con unidades naturales ($\frac{\hbar}{2\pi} = c = v_F = 1$).

AGNRs sin distorsión, simetrías y espectro

En el límite del continuo, el modelo macroscópico del grafeno [1], está dado por el Hamiltoniano de Dirac [9]: $\mathbf{H}_0 = -(\mathbf{k}_1 \tau_3 \otimes \sigma_1 + \mathbf{k}_2 \tau_0 \otimes \sigma_2)$, donde σ_i y $\tau_i, i = 1, 2, 3$, son las matrices de Pauli actuando sobre los subespacios de subred y de los puntos de Dirac [10]. Siendo τ_0 es la matriz identidad 2×2 , y $k_j = -i \partial_j, j = 1, 2$.

El Hamiltoniano \mathbf{H}_0 actúa sobre espinores de la forma $\psi = (\psi_A, \psi_B, -\psi'_A, -\psi'_B)^T$, donde $\psi_{A,B}^{(0)} = \psi_{A,B}^{(0)}(x^1, x^2)$ son las funciones de onda del electrón correspondiente a la subred A (B), y al valle $K^{(0)}$.

Dada una cinta de ancho W , las condiciones de contorno armchair metálicas nos imponen la siguiente restricción:

$$\psi(x^1 = 0, W) = -\tau_1 \otimes \sigma_0 \psi(x^1 = 0, W) \quad (1)$$

Si elegimos la siguiente representación de las matrices Υ de 4×4 :

$$\Gamma^0 = -\tau_2 \otimes \sigma_1, \Gamma^1 = -i\tau_1 \otimes \sigma_0, \Gamma^2 = -i\tau_2 \otimes \sigma_3, \Gamma^3 = -i\tau_2 \otimes \sigma_2 \quad (2)$$

El Hamiltoniano a estudiar, en esta representación, puede ser escrito como

$$H_m = \Gamma^0 (i\Gamma^1 \partial_1 + i\Gamma^2 \partial_2 - M) \quad (3)$$

donde hemos introducido un término de masa genérico M .

Además de las simetrías discretas del Hamiltoniano H_0 conocidas como inversión espacial \mathcal{P} y temporal $\mathcal{T} = TC$, donde C es conjugación de carga:

$$\mathcal{P}H_0(k)\mathcal{P} = H_0(-k), \quad \mathcal{T}H_0^*(k)\mathcal{T} = H_0(-k) \quad (4)$$

existen dos simetrías más, una unitaria \mathcal{P}_0 conocida como simetría de la subred o quiral y otra antiunitaria \mathcal{T}_0 , compatibles con la condición de contorno y tales que:

$$\mathcal{P}_0 H_0(k) \mathcal{P}_0 = -H_0(k), \quad \mathcal{T}_0 H_0^*(k) \mathcal{T}_0 = -H_0(k) \quad (5)$$

Finalmente, existe una simetría adicional unitaria del sistema que hace que la conducta de las AGNRs sea tan peculiar. En efecto:

$$\mathcal{L}H_0(k) = H_0\mathcal{L}, \quad \mathcal{L} = \tau_1 \otimes \sigma_2 = \Gamma^3 \Gamma^2 \quad (6)$$

además la condición de contorno (1) permanece invariante frente a \mathcal{L} .

De su acción sobre las componentes del espinor observamos que al actuar sobre este cambia según:

$$(AK, BK, -AK' - BK')^T \rightarrow i(BK', -AK', -BK, AK)^T \quad (7)$$

Aquí podemos reconocer una rotación de $\pi/3$ de la cinta, por lo tanto, bajo tal rotación, el borde armchair se transforma él mismo en armchair pero con los índices de subred corridos, mientras que la rotación de la primer zona de Brillouin produce un intercambio de los puntos de Dirac.

El espectro del Hamiltoniano H_0 con condiciones armchair se obtiene fácilmente si proponemos que las autofunciones puedan ser escritas como

$$\psi(x^1, x^2) = \varphi(x^1) e^{ik_2 x^2} \quad (8)$$

Cuando reemplazamos este ansatz en la ecuación de autoestados $H_0 \psi(x^1, x^2) = \Omega \psi(x^1, x^2)$ e imponiendo las condiciones de contorno (1) encontramos dos ramas diferentes del espectro. La primera corresponde a los modos con gap, cuya energía está dada por:

$$\varepsilon(k_1, k_2) = \alpha \sqrt{\left(n \frac{\pi}{W}\right)^2 + k_2^2}, \quad \alpha = \pm 1, \quad n = 1, 2, 3 \dots \quad (9)$$

la segunda rama corresponde a las energías sin gap no degeneradas:

$$\varepsilon(k_1, k_2) = \alpha k_2, \quad \alpha = \pm 1 \quad (10)$$

Entonces, el espectro de una nanocinta armchair metálica sin distorsión posee una rama sin gap y, por lo tanto, el sistema muestra una conducta metálica.

Posibles términos de masa. Presencia de modos de borde

Como mencionamos en la sección anterior, las AGNRs sin masa tienen un espectro sin gap y, por tanto, poseen canales conductores.

Los términos de masa que pueden abrir un gap [8, 11], en general, deben satisfacer alguna relación de anticonmutación de manera de obtener un Hamiltoniano del tipo de Klein-Gordon. A saber, deben satisfacer:

$$\{\Gamma^0 \Gamma^1, \Gamma^0 M\} = \{\Gamma^0 \Gamma^2, \Gamma^0 M\} \quad (11)$$

Sin embargo, esta condición, por sí sola, no asegura la apertura de un gap en el sistema considerado. Tal situación es conocida para los aislantes topológicos en dos

dimensiones (TI2D) donde existen estados de borde sin gap, cuyas propiedades están protegidos por la simetría antiunitaria de inversión temporal.

Las matrices M que satisfacen (11) son cuatro:

$$M = m I; M_5 = im_5 \Gamma^5; M_3 = m_3 \Gamma^3; M_{53} = m_{53} \Gamma^5 \Gamma^3 \tag{12}$$

donde I es la matriz identidad de 4×4 . En los dos primeros términos reconocemos la parte real e imaginaria de Kekulé, siendo M el término conocido como masa de Dirac, el tercero es la masa de Semenoff y finalmente el último es la masa de Haldane (ver [8,11]).

En el Hamiltoniano masivo $H_m \equiv H_0 - \mathfrak{M}$, los anteriores términos de masa corresponden a los siguientes términos:

$$\mathfrak{M} = m_0 \Gamma^0, \quad \mathfrak{M}_5 = im_5 \Gamma^0 \Gamma^5, \quad \mathfrak{M}_3 = m_3 \Gamma^0 \Gamma^3, \quad \mathfrak{M}_{53} = m_{53} \Gamma^0 \Gamma^5 \Gamma^3 \tag{13}$$

Se puede comprobar que, cada uno de ellos, satisfacen las simetrías anteriormente mencionadas, ver ecs. (4), (5) y (6), con H_m en lugar de H_0 . Las conclusiones de tal análisis se resumen en la siguiente tabla:

	\mathcal{P}	\mathcal{T}	\mathcal{P}_0	\mathcal{T}_0	\mathcal{L}
\mathfrak{M}	No	Yes	Yes	No	Yes
\mathfrak{M}_5	Yes	Yes	Yes	No	No
\mathfrak{M}_3	No	Yes	No	Yes	No
\mathfrak{M}_{53}	Yes	No	No	Yes	Yes

Hemos demostrado [12] que los únicos términos de masa que admiten la presencia de modos sin gap son los que preservan L . Además observamos, a partir de la tabla anterior, que en todos los casos podemos garantizar que el espectro de energías es simétrico, ya sea por \mathcal{P}_0 o por \mathcal{T}_0 .

Estudiamos el espectro del operador de Dirac modificado $D = i\partial_0 - H_m$, donde el término de masa para H_m está dado por la distorsión completa de Kekulé $M = m I + im_5 \Gamma^5$, que además de abrir el gap, posee estados localizados en el borde de la AGNRs.

En este caso mostramos, [13], que el espectro presenta una rama de **modos concentrados en el borde no degenerados**, con gap dada por:

$$\varepsilon_1(k_0, k_1, k_2) = k_0 + \alpha \sqrt{k_2^2 + m_5^2}, \quad \alpha = \pm 1 \tag{14}$$

Por otro lado, las energías correspondientes a los **modos ordinarios degenerados**, que abren el gap, están dadas por:

$$\varepsilon_2(k_0, k_1, k_2) = \varepsilon_3(k_0, k_1, k_2) = \alpha \sqrt{\left(n \frac{\pi}{W}\right)^2 + k_2^2 + m^2 + m_5^2}, \quad \alpha = \pm 1, \quad n = 1, 2, 3. \tag{15}$$

Destacamos que un hecho interesante de la distorsión de Kekulé es la presencia de

dos ramas del espectro con diferentes gaps: $2m$ y $2\sqrt{\left(\frac{\pi}{W}\right)^2 + k_2^2 + m^2 + m_5^2}$, el primero corresponde a los modos de borde.

Utilizando TCC hemos podido calcular la contribución de cada uno de estos modos a las propiedades básicas de transporte de las nanocintas de Kekulé: densidad de carga media y conductividad longitudinal, en presencia de un potencial químico μ e impureza Γ . En este trabajo mostraremos únicamente la contribución de los modos de borde a tales propiedades.

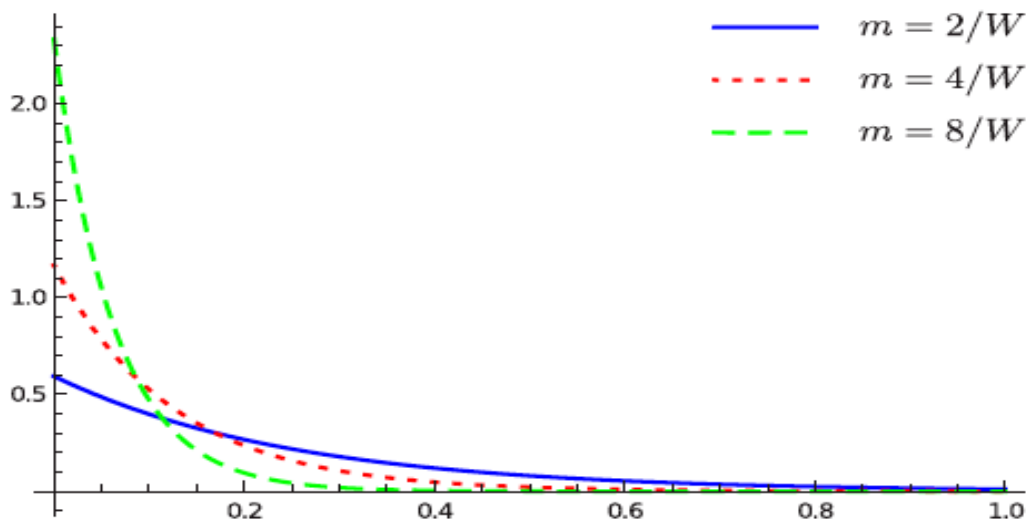
La densidad local de partículas, para los modos concentrados en el borde, en el límite en que $\Gamma \rightarrow 0$ resulta, en unidades físicas:

$$n^{(\text{exp})R} = \frac{\text{sgn } \mu}{\pi \hbar^2 v_F^2} \frac{2 m e^{\frac{2 m x^1}{\hbar v_F}}}{1 - e^{-\frac{2 m W}{\hbar v_F}}} \Theta(\mu^2 - m_s^2) \sqrt{\mu^2 - m_s^2}, \quad (15)$$

donde $v_F = \frac{c}{300}$, μ, m y m_s tienen dimensiones de energía.

Por lo tanto, si μ es suficientemente pequeño pero tal que $m_s < |\mu| < \sqrt{m^2 + m_s^2 + \hbar^2 v_F^2 \frac{\pi^2}{W^2}}$, donde $\sqrt{m^2 + m_s^2 + \hbar^2 v_F^2 \frac{\pi^2}{W^2}}$ corresponde a la energía del primer estado correspondiente a los modos ordinarios, la contribución de estos modos a la densidad de carga inducida en una cinta AGNR metálica está localizada en el borde $x^1 = 0$.

En la siguiente figura podemos ver el perfil de $n^{(\text{exp})R}$, para diferentes relaciones entre m y W , como función de la coordenada x^1 .



Densidad de carga $n^{(\text{exp})R}$ como función de la posición relativa a respecto del ancho de la cinta para $m = \frac{2}{W}, \frac{4}{W}, \frac{8}{W}, m_s = \frac{2}{W}$ y $\mu = 1.1 m_s$, en unidades naturales.

Para calcular la contribución de estos modos a la conductividad longitudinal usamos la expresión análoga a la fórmula de Kubo. Para pequeños Γ , y **en el límite dc** encontramos, en unidades físicas:

$$\sigma_{22}^{(\text{exp})R}(\omega = 0) = \frac{e^2}{2\pi W \Gamma |\mu|} \Theta(\mu^2 - m_s^2) \sqrt{\mu^2 - m_s^2} + \dots \quad (16)$$

donde e es la carga del electrón, W el ancho de la cinta y los puntos suspensivos indican términos de orden $\frac{1}{\sqrt{\Gamma}}$.

Nuevamente, la contribución de los modos concentrados a la conductividad dc puede ser fácilmente identificada siempre y cuando $m_s < |\mu| < \sqrt{m^2 + m_s^2 + \hbar^2 v_F^2 \frac{\pi^2}{W^2}}$.

CONCLUSIONES

En primer lugar, demostramos que las nanocintas de grafeno armchair conductoras permiten, en presencia de ciertas distorsiones, la existencia de modos (exponenciales) de borde. Esto es opuesto a la afirmación de que tales modos son exclusivos de las nanocintas de grafeno zigzag. Para las cintas armchair conductoras tales modos pueden ser modos con o gap o sin él, dependiendo del tipo de masa presente en el Hamiltoniano libre. Más precisamente, hemos probado que estos modos pertenecen al subespacio determinado por las condiciones de contorno, no solo en los bordes sino a lo ancho de la cinta. También demostramos que tales modos no tienen gap siempre que una simetría particular \mathcal{L} , interpretada como una rotación en $\frac{\pi}{3}$, sea respetada por la distorsión.

Como ejemplo particular, donde los modos con gap existen, hemos estudiado la distorsión completa de Kekulé, que puede ser representada como la suma de dos términos anticonmutantes en el Hamiltoniano $(M + M_5)$, que rompe \mathcal{L} . Calculamos el espectro, la densidad local de carga de los portadores y la conductividad longitudinal dc para los modos de borde. Encontramos el rango de valores del potencial químico o potencial de gate, al cual sometemos las AGNRs con la distorsión de Kekulé, para detectar la presencia de los modos concentrados al medir la densidad de carga local de los portadores, densidad de carga media y, en el régimen de desorden pequeño, la conductividad dc.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] A. H. Castro Neto, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [2] M. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2012).
- [3] K. Wakabayashi, K.-i. Sasaki, T. Nakanishi, and T. Enoki, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **11**, 054504 (2010).
- [4] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **54**, 17954 (1996).
- [5] C.-Y. Hou, C. Chamon, and C. Mudry, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 186809 (2007).
- [6] I. V. Fialkovsky and D. V. Vassilevich, *Int. J. Mod. Phys. A* **27**, 1260007 (2012).
- [7] I. V. Fialkovsky and D. V. Vassilevich, *Mod. Phys. Lett. A* **31**, 1630047 (2016).
- [8] C. Chamon, C.-Y. Hou, C. Mudry, S. Ryu, and L. Santos, *Phys. Scr.* **T146**, 014013 (2012).
- [9] L. Brey and H. A. Fertig, *Phys. Rev. B* **73**, 235411 (2006).
- [10] C. W. J. Beenakker, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1337 (2008).
- [11] V. P. Gusynin, S. G. Sharapov, and J. P. Carbotte, *Int. J. Mod. Phys. B* **21**, 4611 (2007).
- [12] C. G. Beneventano, I. V. Fialkovsky, M. Nieto, and E. M. Santangelo *Phys. Rev. B* **97**, 155406.