



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MÉXICO

CENTRO DE NANOCIENCIAS Y NANOTECNOLOGÍA

Interacción espín-órbita del tipo Rashba
modificada por distorsión Kekulé en grafeno

Tesis

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
LICENCIADO EN NANOTECNOLOGÍA

P R E S E N T A:

JESÚS ARTURO SÁNCHEZ SÁNCHEZ

TUTOR DE TESIS

Dr. Francisco Mireles Higuera

Ensenada Baja California a Octubre 2019





Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

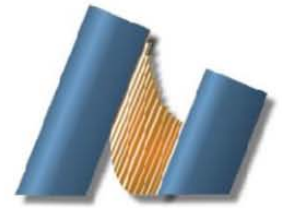
DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
CENTRO DE NANOCIENCIAS Y NANOTECNOLOGÍA



LICENCIATURA EN NANOTECNOLOGÍA
Eje de Nanoestructuras

Interacción espín-órbita del tipo Rashba modificada por distorsión Kekulé en grafeno

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL TÍTULO DE:
LICENCIADO EN NANOTECNOLOGÍA

PRESENTA:
JESÚS ARTURO SÁNCHEZ SÁNCHEZ

DIRECTOR DE TESIS
Dr. Francisco Mireles Higuera

ENSENADA, BAJA CALIFORNIA OCTUBRE 2019

Hago constar que el trabajo que presento es de mi autoría y que todas las ideas, citas textuales, datos, ilustraciones, gráficas, etc. sacados de cualquier obra o debidas al trabajo de terceros, han sido debidamente identificados y citados en el cuerpo del texto y en la bibliografía y acepto que en caso de no respetar lo anterior puedo ser sujeto de sanciones universitarias.

Afirmo que el material presentado no se encuentra protegido por derechos de autor y me hago responsable de cualquier reclamo relacionado con la violación de derechos de autor.

Jesús Arturo Sánchez Sánchez

Para JASS, que siga demostrando.

Agradecimientos

En primer lugar, quiero agradecer a la Universidad Nacional Autónoma de México, al Centro de Nanociencias y Nanotecnología junto a la Licenciatura en Nanotecnología. La educación de alta calidad, la exigencia y los medios que me fueron provistos durante mi formación universitaria son la base académica sobre la cual se erige este trabajo. Quiero agradecer a mi director de tesis, el Dr. Francisco Mireles y a mis sinodales, el Dr. Manuel Herrera y el Dr. Ramón Carrillo.

En segundo lugar, quiero agradecer a dos investigadores en particular. Le agradezco al Dr. Francisco Mireles, que fungió como un verdadero guía durante la realización de este trabajo. Por medio de una ética de trabajo inigualable, logró armarme con las herramientas necesarias para resolver los problemas que surgieron durante el proceso. Asimismo, quiero agradecer a mi profesor de la licenciatura, el Dr. Jesús Maytorena que fue una de las primeras fuentes de inspiración que tuve para seguir el camino del teórico con sus aportaciones tanto dentro como fuera del salón de clases. Ambos me ayudaron a poner las primeras piedras en mi camino científico.

En tercer lugar, quiero agradecer a mis amigos. Sin ellos, a mi paso por la licenciatura le faltarían una cantidad monumental de buenas experiencias que recordaré toda mi vida. Quiero reconocer en especial a Santiago, mi compañero de grafeno, que me acompañó durante este arduo pero gratificante proceso.

En cuarto lugar, quiero agradecer a Jazmín. Le agradezco los momentos que compartimos los últimos tres años y el impacto tan positivo ha tenido en mí. Me motiva a ser un mejor científico y persona.

Finalmente, no alcanzan las hojas para terminar de agradecer a mi familia. El apoyo y la confianza que depositaron en mi es el principal factor por el que este día concluyo mis estudios de licenciatura. Mis logros siempre serán un reflejo de su amor y siempre será mi consigna enorgullecerlos.

Resumen

Con la obtención de láminas de carbono con espesor atómico por parte de K.S. Novoselov y A.K. Gleim en 2004, comenzó el auge del estudio tanto teórico como experimental de las propiedades únicas y fascinantes del grafeno prístino. En particular, la modificación de dichas propiedades son temas de actual escrutinio en la investigación del grafeno. Entre las modificaciones más investigadas en la actualidad se encuentran las distorsiones de la red de grafeno y el acoplamiento espín-órbita inducido por efectos de proximidad. La obtención de grafeno con distorsión Kekulé por parte de C. Gutierrez en 2016 y la posibilidad de inducir un acoplamiento espín-órbita de Rashba al sistema mediante un campo eléctrico externo o interacción con el sustrato motivan el estudio teórico de la modificación y control de las propiedades electrónicas de dicho sistema. Esto conforma el objeto central de esta tesis.

Desde el punto de vista teórico, para investigar las propiedades electrónicas del grafeno debido a la acción conjunta de la distorsión Kekulé y el acoplamiento espín-órbita de Rashba es necesario realizar una deducción sistemática del Hamiltoniano efectivo que gobierna la cinemática de sus cuasi-partículas a bajas energías. Con este fin en mente, en esta tesis se parte de un Hamiltoniano en el marco del modelo de amarre fuerte para grafeno prístino con acoplamiento espín-órbita de Rashba. La distorsión Kekulé se toma en consideración tanto en el parámetro de la energía de salto $t_{i,j}$ como en la magnitud del acoplamiento espín-órbita de Rashba $\lambda_{i,j}$ entre átomos de carbono vecinos i, j . Estos parámetros dependen explícitamente de la distancia carbono-carbono, la cual es modificada de manera periódica por la distorsión Kekulé.

La forma compacta del Hamiltoniano efectivo obtenido presenta dos clases de términos de acoplamiento. La primer clase corresponde al acoplamiento entre el momento

\mathbf{p} y los 2 grados de libertad que posee un portador de carga en el grafeno; pseudoespín σ y valle τ . La segunda clase corresponde al acoplamiento entre del espín \mathbf{s} , el grado de libertad inherente al electrón, con el pseudoespín σ y valle τ . Las dispersiones energéticas obtenidas del Hamiltoniano efectivo manifiestan un comportamiento nuevo con características heredadas de la acción conjunta de la distorsión Kekulé como del acoplamiento espín-órbita de Rashba. El Hamiltoniano efectivo derivado en esta tesis es consistente con los resultados obtenidos anteriormente para grafeno con distorsiones Kekulé (en ausencia de acoplamiento espín-órbita de Rashba) por parte de Gamayun et al. y para grafeno con acoplamiento espín-órbita de Rashba (sin distorsión Kekulé) por parte de E. Rashba y Y. Bychkov. Finalmente, se calcularon las orientaciones de espín, pseudoespín y valle a partir de los eigenvectores del Hamiltoniano efectivo. Aunque estas orientaciones también presentan características heredadas de los sistemas de grafeno con distorsiones Kekulé y grafeno con acoplamiento espín-órbita de Rashba, además, muestran un comportamiento nuevo. La orientación de valle muestra componentes fuera del plano de movimiento de los portadores de carga, por convención el plano x-y, así como orientación preferencial en una dirección del plano, dicese en la dirección x. Este resultado motiva trabajo futuro en aras de explicar el origen de estas nuevas características de las orientaciones del espín, pseudoespín y valle.

Índice general

Agradecimientos	v
Resumen	vi
Prefacio	xiii
1. Introducción	1
1.1. Estructura de bandas del grafeno	1
1.2. Simetrías del grafeno	5
1.3. Distorsiones Kekulé en grafeno	5
1.4. Interacción espín-órbita de Rashba en grafeno	7
2. Antecedentes	12
2.1. Grafeno con distorsiones Kekulé: Evidencia experimental	12
2.2. Grafeno con distorsion Kekulé: Modelo teórico	15
2.3. Efecto Rashba inducido por deformaciones en grafeno	18
3. Hipótesis y Objetivos	21
3.1. Hipótesis	21
3.2. Objetivos	21
3.2.1. Objetivo General	21
3.2.2. Objetivos específicos	22
4. Derivación del Hamiltoniano efectivo	23
4.1. Hamiltoniano: modelo en amarre fuerte	23

4.2. Expansión de la base del Hamiltoniano en espacio recíproco	26
4.3. Forma matricial del Hamiltoniano en espacio reíproco	28
4.4. Cambios de base diagonal en espín	30
4.5. Hamiltoniano efectivo de grafeno con textura Kekulé y presencia de RSOC	31
4.6. Forma compacta del Hamiltoniano efectivo de grafeno con textura Ke- kulé y presencia de RSOC	32
5. Dispersiones de grafeno con Kekulé y RSOC	35
5.1. Eigenenergías del sistema	35
6. Orientación de espín, pseudoespín y valle	40
6.1. Cálculo numérico de la orientación de espín, pseudoespín e valle . . .	40
7. Conclusiones	44
Apéndice	51
7.1. Identidades de $\varepsilon(\mathbf{k})$	51
7.2. Evaluación del Hamiltoniano en $\mathbf{k} \pm \mathbf{G}$	51
7.3. Expansiones a primer orden de $\varepsilon_{\pm 1}$ y ε_0	53
7.4. Hamiltonianos para grafeno con textura Kekulé y presencia de RSOC	54
7.5. Forma alternativa de los Hamiltonianos para grafeno con textura Ke- kulé y presencia de RSOC	55

Índice de figuras

1.1. a) Red directa de grafeno con vectores directos \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 con vectores de los primeros vecinos $\boldsymbol{\delta}_j$ ($j=1,2,3$) de un átomo de carbono dado, su correspondiente b) red recíproca con vectores recíprocos \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 así como los puntos K, K' y M de alta simetría en la primera zona de Brillouin (hexágono negro).Ref[1]	2
1.2. Dispersión electrónica del grafeno en una celda unitaria del espacio recíproco como función de \mathbf{k} con un acercamiento a los puntos de Dirac. En dicho acercamiento se aprecia el comportamiento lineal a bajas energías de la dispersión electrónica en grafeno en la vecindad de los puntos de Dirac, K y K'. Ref.[1]	4
1.3. Diagrama esquemático de grafeno con patrón Kekulé donde las letras A,B y C etiquetan hexágonos equivalentes y los enlaces dobles denotan enlaces acortados con respecto a los enlaces simples más largos. Ref[2]	6
1.4. Dispersión electrónica de un 2DEG bajo RSOC para $k_x = 0$. Nótese que el RSOC rompe la degeneración de espín en momento ya que a un valor dado de energía E le corresponden dos valores diferentes de \mathbf{k} . Ref. [3]	9
1.5. Dispersión electrónica de grafeno bajo RSOC para $k_y=0$ con la dispersión lineal (líneas negras punteadas) para el caso en el que $\lambda = 0$. La diferencia entre eigenenergías, por ejemplo entre la dispersión roja y la azul, depende del índice μ y es igual a λ_R . Ref. [3]	10

2.1. a) Imagen de STM donde se identifican la celda original en morado y la nueva supercelda en azul. Asimismo se muestran los vectores de la red directa correspondientes a la red prístina (en blanco) y a la nueva red (en negro). b) Diagrama del patrón Kek-Y donde los enlaces azules indican un acortamiento de la distancia carbono-carbono y se incluyen los nuevos vectores de la red. Además, se presenta un mosaico de colores que permite identificar hexágonos equivalentes y denota la nueva supercelda. Ref. [4] 13

2.2. Diagrama esquemático de la red de grafeno prístino (A), textura Kek-O (B) y textura Kek-Y (C). Los enlaces negros corresponden a la distancia carbono-carbono $a_0 = 1.42 \text{ \AA}$ mientras que los enlaces rojos y azules corresponden a enlaces acortados 24 % y alargados 13 %, respectivamente. Además, cada esquemático cuenta a su derecha con una sección de la red. Las texturas Kekulé presentan un mosaico de colores que identifica hexágonos similares junto a los nuevos vectores (amarillos) de la supercelda de Kekulé. Ref. [5] 14

2.3. Diagramas esquemáticos de las texturas Kekulé en grafeno Kek-O ($\nu = 0$) y Kek-Y ($\nu = \pm 1$). Los enlaces rojos y negros denotan distancias de enlace diferentes. En la esquina superior derecha se muestra la nueva celda unitaria recíproca y la zona de Brillouin reducida (hexágono amarillo) que comparten las tres texturas. Ref. [6] 16

2.4. Dispersión energética para grafeno con textura Kek-Y ($\nu = 1$) con un valor dado de $\Delta_0 = 0.1$. Para el caso Kek-Y, se mantiene el comportamiento lineal de los electrones en grafeno. Sin embargo, se rompe la degeneración en valle y se producen dos conos (para $\sigma = \pm$) con pendientes $v_0(1 \pm \Delta_0)$. La dispersión de la textura Kek-O ($\nu = 0$) es graficada como referencia y mantiene la degeneración en valle mientras que presenta una brecha de energía. Ref. [6] 17

2.5. Comportamiento de los parámetros $t_j(\xi)/t^{(0)}$ y $\lambda_R(\xi)/\lambda_R^{(0)}$ con respecto a $\xi = \frac{|\delta_j|}{a_0}$. Mientras que $t_j(\xi)/t^{(0)}$ decrece a manera que la deformación ξ aumenta, $\lambda_R(\xi)/\lambda_R^{(0)}$ aumenta a manera que ξ aumenta. Ref.[7] 19

2.6. Dispersión energética de grafeno bajo acoplamiento espín-órbita de Rashba y en presencia de deformación uniaxial ε . A medida que la deformación ε aumenta, también aumenta la brecha de energía entre electrón y hueco mientras que la separación entre estados de espín contrario se mantiene constante. Asimismo, las dispersiones se corren en momento si ε denota una contracción o un estiramiento de la red de grafeno. Ref. [7] 20

4.1. Diagramas esquemáticos de a) la red directa de grafeno y b) la celda unitaria en el espacio recíproco. Los vectores de la red directa \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 recorren las subred A(B) mientras que los vectores a los primeros vecinos δ_j , $j = 1, 2, 3$ conectan un átomo A con los tres átomos B circundantes. Los vectores recíprocos asociados a los puntos K y K' en las esquinas de la primera zona de Brilluoin (hexágono amarillo) son \mathbf{K}_\pm , respectivamente. 24

5.1. Dispersión electrónica de grafeno con Kek-Y y RSOC para $k_y = 0$ y $k = |\mathbf{k}| = kx$. Un código de colores etiqueta cada eigenenergía mientras que los índices σ , τ , y s diferencian entre electrón/hueco, valle +/- y espín +/-, respectivamente. 36

5.2. Dispersión electrónica de grafeno con Kek-O y RSOC para $k_y = 0$ y $k = |\mathbf{k}| = kx$. Un código de colores etiqueta cada eigenenergía mientras que los índices σ , τ , y s diferencian entre electrón/hueco, valle (+)/(-) y espín (+)/(-), respectivamente. 38

6.1. Orientaciones de a) espín $\langle \mathbf{s} \rangle$, b) pseudoespín $\langle \dots \rangle$ 41

6.2. Orientaciones de a) espín $\langle \mathbf{s} \rangle$, b) pseudoespín $\langle \dots \rangle$ 42

Prefacio

Grafeno es el nombre que recibe el arreglo cristalino bidimensional de átomos de carbono. La hibridación sp^2 de los átomos de carbono en el plano forma un característico patrón hexagonal. Asimismo, una conjugación π de largo alcance asociada a los orbitales p_z de los átomos de carbono deriva en extraordinarias propiedades térmicas, mecánicas y eléctricas. Dado que el grafeno es la base de otros alótopos del carbono como los nanotubos de carbono y el grafito, su estudio es crucial para entender la física de los alótopos de mayor dimensionalidad.[8]

Tras su obtención mediante exfoliación mecánica en 2004 [9], el grafeno dejó de ser un ejercicio teórico y pasó a tomar protagonismo por sí solo. El desarrollo de métodos de síntesis como la exfoliación mecánica, deposición química en fase vapor y descomposición térmica de precursores, entre otras, ha permitido llevar el grafeno a múltiples laboratorios del mundo. [10] La investigación ha sido intensiva y hoy en día se sabe que el grafeno posee alta conductividad térmica, presenta Efecto Hall Cuántico (QHE por sus siglas en inglés) a temperatura ambiente, posee un módulo de Young cercano a 1 TPa y se caracteriza por una alta transmitancia óptica, mientras que en presencia de un voltaje de compuerta el grafeno presenta un comportamiento ambipolar de efecto de campo.[11, 12] Además, el grafeno se presta como modelo para estudiar fenómenos relativistas a bajas energías. Todas estas características convierten al grafeno y a sus derivados en candidatos para aplicaciones en áreas como electrónica, biomedicina y ciencia de materiales. [13]

En particular, las propiedades electrónicas del grafeno han atraído un enorme interés. El grafeno es considerado un semi-metal con una estructura de bandas lineal en momento y sin brecha energética. Los portadores de carga en el grafeno se compor-

tan como Fermiones de Dirac sin masa, lo que permite el transporte balístico hasta por un micrómetro de distancia a temperatura ambiente. La alta movilidad de los portadores en el grafeno, con valores típicos de 15,000-200,000 cm^2/Vs , lo convierte en un candidato idóneo para aplicaciones electrónicas que involucren alta movilidad y tiempos cortos de respuesta.[14]

Además de la miríada de propiedades encontradas en grafeno prístino, sistemas híbridos de grafeno y sustratos metálicos presentan nuevos e interesantes fenómenos tanto electrónicos como magnéticos derivados de efectos de proximidad con diferentes sustratos. Esta interacción puede generar brechas entre las bandas de conducción π (electrones) y de valencia π^* (huecos), distorsionar el comportamiento lineal de los portadores de carga, promover la aparición del Efecto Hall Anómalo, el Efecto Hall de Espín, el Efecto Hall Cuántico de Espín (AHE, SHE y SQHE por sus siglas en inglés) así como la modulación de la intensidad de la interacción espín-órbita (SOI por sus siglas en inglés). [15] Estas modificaciones a la estructura de bandas promete ser una solución al problema de la implementación del grafeno en la electrónica de la siguiente generación; la espintrónica. [16]

Por un lado, la débil interacción espín-órbita debido al bajo número atómico del carbono ya no es un impedimento para que éste sea considerado como objeto de estudio de fenómenos y aplicaciones espintrónicas. Gracias a los ya mencionados efectos de proximidad, el acoplamiento espín-órbita en grafeno puede aumentar hasta 3 órdenes de magnitud. [17] Los mecanismos a los que se les atribuye tal magnificación son i) la fuerte hibridación entre los orbitales $2p_z$ del carbono con los orbitales d del sustrato metálico (como Au, Ag y Pb) y ii) el rompimiento de la simetría de la red de grafeno. De esta forma, la brecha asociada a la interacción espín-órbita puede alcanzar valores de $13 - 225 \text{ meV}$ que eclipsan al valor intrínseco del grafeno de menos de $50 \mu\text{eV}$. [18, 19, 20, 21, 22]

Por otro lado, la interacción con el sustrato puede producir deformaciones en la red de grafeno que modifiquen su estructura electrónica. Cuando la periodicidad del sustrato es equiparable a la de una supercelda de grafeno, se predice la existencia de una deformación periódica conocida como distorsión Kekulé.[23] Recientemente,

Gutierrez et al. [4] lograron visualizar esta distorsión en grafeno crecido epitaxialmente sobre una superficie de Cu (111) y atribuyen su existencia a las vacancias de Cu que fungen como adátomos fantasma. Asimismo, se predice que la nueva supercelda de grafeno pierde su simetría quirral y da lugar a dos especies de fermiones quirales de Dirac. [6, 24]

Por medio de estos dos mecanismos, las distorsiones de Kekulé y el acoplamiento espín-órbita de Rashba, se presenta la posibilidad de modificar las propiedades electrónicas del grafeno en aras de reconsiderarlo en el esquema de la electrónica convencional. [25, 26] El primer mecanismo se basa en romper la simetría quirral del grafeno al alterar de manera periódica las distancias de enlace entre átomos de carbono.[27] En el segundo mecanismo, los portadores de carga en un semiconductor experimentan un campo magnético efectivo dependiente de su momento debido al acoplamiento espín-órbita. De manera similar a un campo magnético externo, este campo magnético efectivo rompe la degeneración entre portadores con espín contrario. Pero a diferencia de un campo magnético externo, el rompimiento de la degeneración es en momento y no en energía como sucede en el Efecto Zeeman.[28] Es objeto de este trabajo realizar un estudio teórico del comportamiento electrónico dentro del modelo de amarre fuerte de un sistema de grafeno con distorsiones de Kekulé en presencia de acoplamiento espín-órbita de Rashba.

Capítulo 1

Introducción

1.1. Estructura de bandas del grafeno

El grafeno está conformado por una red cristalina hexagonal de átomos de carbono. En la red directa del grafeno se distinguen dos subredes triangulares superpuestas, la subred de átomos A y la subred de átomos B (ver Figura 1.1a). Otra forma de describir la estructura atómica del grafeno es como una red triangular con una base de dos átomos. Los vectores \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 son los vectores de la red directa que recorren la red triangular, mientras que los vectores $\boldsymbol{\delta}_j$ ($j=1,2,3$) son los vectores de los 3 vecinos cercanos y conectan las dos subredes. En la Figura 1.1b se muestra la red recíproca del grafeno, una red triangular rotada 30° con respecto a la red directa, con vectores de la red recíproca \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 . La importancia de los puntos K y K' en las esquinas de la zona de Brillouin (BZ por sus siglas en inglés), el hexágono delimitado por líneas negras, será discutida más adelante.

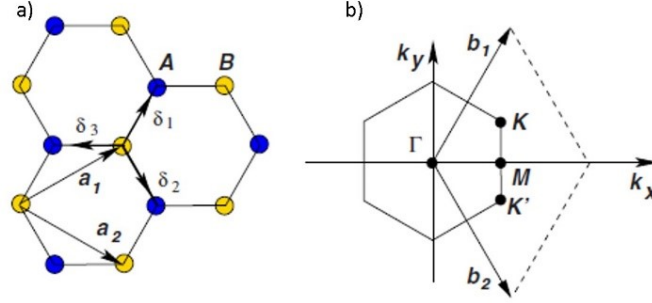


Figura 1.1: a) Red directa de grafeno con vectores directos \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 con vectores de los primeros vecinos δ_j ($j=1,2,3$) de un átomo de carbono dado, su correspondiente b) red recíproca con vectores recíprocos \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 así como los puntos K, K' y M de alta simetría en la primera zona de Brillouin (hexágono negro).Ref[1]

Un buen modelo teórico para la descripción del grafeno prístino es el denominado modelo de amarre fuerte (TB por sus siglas en inglés). En este formalismo se aproxima la estructura de bandas de un sólido a partir de los niveles energéticos de un átomo y acercando dichos átomos hasta formar el sólido. Este modelo es particularmente eficaz para describir electrones en sólidos formados por enlaces covalentes, como el grafeno.[29, 30] En este formalismo el Hamiltoniano que dicta la estructura de bandas del grafeno prístino en la notación de sitio está dado por (1.1) .

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger b_j + H.c.) \quad (1.1)$$

En el lenguaje de la segunda cuantización, el operador a_i/b_j aniquila un electrón el sitio i/j de la subred A/B mientras que el hermitiano conjugado (\dagger) de dicho operador crea un electrón en su respectivo sitio. Finalmente, t es el valor numérico de la integral de traslape entre las funciones de onda de dos átomos de carbono vecinos. Este término es conocido como la energía de salto (*hopping*) entre primeros vecinos y posee valores cercanos a 3 eV para grafeno.

A partir de (1.1) se realiza la descomposición de Fourier de los operadores de sitio $c_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}}^\dagger$, donde N es el número de celdas unitarias de grafeno, \mathbf{R} es un vector de la red directa en la n -ésima celda y \mathbf{k} es el vector de onda asociado. De esta

forma se obtiene el Hamiltoniano de grafeno en el espacio recíproco (1.2).

$$H(\mathbf{k}) = -t \sum_{\mathbf{k}} \sum_{j=1}^3 (e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_j} a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + H.c.) \quad (1.2)$$

En este mapeo al espacio recíproco, los operadores de aniquilación/creación deben ser reinterpretados. Ahora $a_{\mathbf{k}}/b_{\mathbf{k}}$ aniquila un electrón con vector de onda \mathbf{k} en la subred A/B mientras que el hermitiano conjugado (\dagger) crea un electrón con dicho vector de onda en la subred B/A. Se puede demostrar que la estructura de bandas asociada al Hamiltoniano (1.2) está descrita por (1.3), donde $E(\mathbf{k})$ corresponde a la dispersión electrónica del grafeno. Asimismo, la distancia carbono-carbono se define como $a = 1.42 \text{ \AA}$.

$$E(\mathbf{k}) = \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(k_x a) + 4 \cos(k_x \frac{a}{2}) \cos(k_y \frac{\sqrt{3}a}{2})} \quad (1.3)$$

En la Figura 1.2 se muestra la dispersión electrónica del grafeno descrita en (1.3). El valor positivo de la energía corresponde a la banda de conducción mientras que el valor negativo corresponde a la banda de valencia. Las bandas se tocan en el nivel de Fermi $E_F = E(\mathbf{k}) = 0$ en seis puntos que corresponden a las esquinas de la zona de Brillouin denotadas por los puntos K y K'. Dichos puntos son conocidos como valles o puntos de Dirac. Los vectores asociados a los puntos K y K' se definen de aquí en adelante como \mathbf{K}_+ y \mathbf{K}_- , respectivamente.

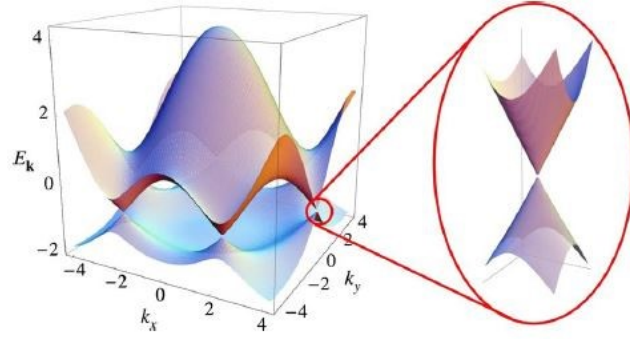


Figura 1.2: Dispersión electrónica del grafeno en una celda unitaria del espacio recíproco como función de \mathbf{k} con un acercamiento a los puntos de Dirac. En dicho acercamiento se aprecia el comportamiento lineal a bajas energías de la dispersión electrónica en grafeno en la vecindad de los puntos de Dirac, K y K'. Ref.[1]

El comportamiento lineal alrededor de los puntos de Dirac (K y K') se obtiene al expandir en \mathbf{k} (1.2) alrededor de \mathbf{K}_{\pm} , donde $|\mathbf{k}| \ll |\mathbf{K}_{\pm}|$. La dispersión lineal resultante (1.4a) es análoga a la energía asociada a partículas ultrarrelativistas descritas mediante la ecuación de Dirac para partículas sin masa dada por (1.4b).

$$E_{\pm} = \pm \hbar v_F |\mathbf{k}| \quad (1.4a)$$

$$E_{Dirac} = \pm \hbar c |\mathbf{k}| \quad (1.4b)$$

En el caso de grafeno, la velocidad de la luz es suplantada por su velocidad de Fermi $v_F = \frac{\sqrt{3}ta}{2\hbar}$, la cual tiene un valor aproximado de $1 \times 10^6 m/s$. [1] Este inusual espectro energético a bajas energías que es descrito de mejor manera por medio de la ecuación de Dirac y no la Schrödinger, es lo que permite la investigación de fenómenos relativistas cuánticos en grafeno sin necesidad de física de altas energías.[12]

1.2. Simetrías del grafeno

El grafeno cuenta con dos simetrías importantes: la simetría de la subred y la simetría quiral. Dichas simetrías y sus grados de libertad son más fáciles de visualizar en la forma matricial de (1.2) alrededor de los puntos de Dirac. En la base $\Psi = (a_{\mathbf{K}_+} b_{\mathbf{K}_+} b_{\mathbf{K}_-} a_{\mathbf{K}_-})^T$ el Hamiltoniano (1.2) se reescribe como (1.5) con ayuda del vector de las matrices de Pauli $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$.

$$H(\mathbf{k}) = \hbar v_F \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

La diferencia fundamental entre la ecuación de Dirac de altas energías y los términos $\pm \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}$ de (1.5) es que el rol del espín real en el primer caso es suplantado por el grado de libertad llamado pseudoespín en el segundo. Este término se deriva naturalmente de la estructura de dos componentes A/B que tienen las funciones de onda en el grafeno. Asimismo, en cada punto \mathbf{K}_{\pm} existe una copia del término asociado al pseudoespín. Sin embargo, las proyecciones del pseudoespín sobre el momento $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}$ en (1.5) portan signo opuesto entre puntos de Dirac. Esta propiedad se conoce como quiralidad. La importancia de los conceptos de quiralidad y pseudoespín yacen en que varios procesos electrónicos que ocurren en grafeno pueden ser entendidos debido a la conservación de estas cantidades. Romper dichas simetrías es uno de los mecanismos más explorados para inducir brechas en la estructura de bandas del grafeno.[11][5]

En las siguientes secciones se ahondará en un mecanismo que rompe la simetría quiral del grafeno mediante deformaciones periódicas de la red que triplican la celda unitaria en el espacio real. En consecuencia, la celda unitaria en el espacio recíproco se reduce a un tercio de su tamaño y los puntos K y K' se vuelven indistinguibles.

1.3. Distorsiones Kekulé en grafeno

El estudio teórico de fenómenos en grafeno para extrapolarlos a alótropos de mayor dimensionalidad era la norma durante el siglo pasado. Sin embargo, estos estudios cobraron relevancia por sí mismos tras la obtención de capas de grafeno por Novoselov

et al. en 2004. [9] Un trabajo fundamental en esta dirección fue realizado en 1990 por C. Chamon [2] al investigar el efecto que tienen las deformaciones periódicas de la red, en particular las del tipo Kekulé, en las propiedades electrónicas de nanotubos de carbono. En la Figura 2.4 se muestra el patrón de dimerización Kekulé, que se asemeja a la estructura del benceno propuesta por Friedrich Kekulé, donde los hexágonos equivalentes se etiquetan con las letras A, B y C. Las líneas dobles representan enlaces más cortos mientras que las líneas simples representan enlaces más largos.

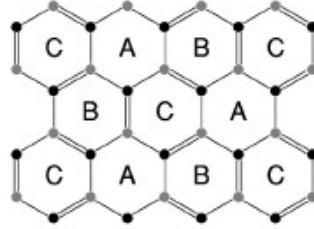


Figura 1.3: Diagrama esquemático de grafeno con patrón Kekulé donde las letras A,B y C etiquetan hexágonos equivalentes y los enlaces dobles denotan enlaces acortados con respecto a los enlaces simples más largos. Ref[2]

El patrón Kekulé triplica la celda unitaria del grafeno, lo que se traduce en una reducción por un factor de $\frac{1}{3}$ de la celda unitaria en el espacio recíproco. Con la reducción de la zona de Brillouin, los valles K y K' se vuelven indistinguibles al convertirse en puntos de la nueva red recíproca. Las repercusiones que tiene esta nueva red recíproca en el comportamiento electrónico del grafeno se discutirá más a detalle en el capítulo siguiente.

Mientras que en el Hamiltoniano (1.2) se asume que el término de salto t es constante dado que las distancias carbono-carbono son iguales, el patrón Kekulé modifica dicha distancia de enlace de forma periódica. Por lo tanto, el término t es reemplazado por $t_{i,j} = t^{(0)} + \delta t_{i,j}$. El superíndice (0) identifica al valor correspondiente a la red prístina. La forma de $\delta t_{i,j}$ derivada por C. Chamón se muestra en (1.6), con $\Delta \equiv -i\alpha\bar{\epsilon} - \frac{\alpha^2}{2}\epsilon^2$ donde α es una constante y ϵ es el vector de desplazamiento efectivo de la red.

$$\frac{\delta t_{i,j}}{t^{(0)}} = \Delta e^{i\mathbf{K}_+ \cdot \boldsymbol{\delta}_j + i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} + H.c. \quad (1.6)$$

La magnitud de Δ describe la modificación a la energía de *hopping*, siendo $\mathbf{G} = \mathbf{K}_+ - \mathbf{K}_-$ un vector de la nueva red recíproca que une los dos valles, ahora equivalentes. En lugar de un solo término de $t_{i,j}$, el Hamiltoniano de grafeno con patrón Kekulé presenta tres términos de energía de *hopping*; uno principal y dos modificaciones dependientes del vecino j -ésimo.

Si bien la distorsión Kekulé se da de manera espontánea en los nanotubos de carbono a raíz de la manera en que están enrollados, en grafeno el origen de la distorsión yace en el sustrato. Para inducir la distorsión Kekulé es necesario que el sustrato tenga una constante de red similar a la supercelda de grafeno. Esto provoca que la capa de grafeno se estire o comprima para empatar con el sustrato. [23] Asimismo, Gutierrez et al. [4] han concluido que las vacancias del sustrato es el principal mecanismo para la formación de la distorsión Kekulé. Estas vacancias distorsionan de manera periódica la distribución electrónica de la hoja de grafeno y dan origen a una deformación de la red.

Romper las simetrías del grafeno no es la única forma de modificar sus propiedades electrónicas. Hasta este punto no se ha mencionado el espín en la dispersión electrónica del grafeno. Esto se debe a que cada banda se encuentra degenerada en espín en el grafeno prístino. Sin embargo, en la siguiente sección se tratará el mecanismo que rompe dicha degeneración e introduce un nuevo grado de libertad a la dispersión electrónica del grafeno.

1.4. Interacción espín-órbita de Rashba en grafeno

De manera general, el acoplamiento espín-órbita (SOC) atómico se deriva de la corrección relativista de la energía de los electrones con momento $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ y espín \mathbf{s} en presencia de un campo eléctrico. Su Hamiltoniano es proporcional al triple producto escalar $\mathbf{s} \cdot (\mathbf{E}(\mathbf{r}) \times \mathbf{p})$ entre el vector operador de espín del electrón $\mathbf{s} = (s_x, s_y, s_z)$, el campo eléctrico $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ y el momento \mathbf{p} del electrón. En el caso particular de sólidos cristalinos que presenten asimetría de inversión, por ejemplo heteroestructuras semiconductoras que confinan electrones en dos dimensiones (2DEG),

se presenta un acoplamiento espín-órbita debido al campo eléctrico efectivo que experimentan dichos electrones. Este acoplamiento efectivo se denomina efecto espín-órbita de Rashba (RSOC). [31]

Particularmente, si la asimetría del pozo de potencial es tal que genera un campo eléctrico $\mathbf{E}(z) = E\hat{\mathbf{z}}$ perpendicular a un 2DEG, el Hamiltoniano de RSOC para semiconductores tiene la forma de (1.7). Es de notar que para un 2DEG el momento está dado por $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$.

$$H_{RSOC} = \frac{\alpha}{\hbar}(\mathbf{s} \times \mathbf{p})_z \quad (1.7)$$

El término α depende del material y del potencial de confinamiento. Por lo tanto, el Hamiltoniano total en semiconductores para un 2DEG en presencia de RSOC tiene la forma de (1.8).

$$H_{2DEG} = H_0 + H_{RSOC}, \quad H_0 = \frac{p^2}{2m} \quad (1.8)$$

Las dispersiones energéticas para un 2DEG en presencia de RSOC derivadas de (1.8) están dadas por (1.9), donde $k = |\mathbf{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$.

$$E_{2DEG} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \alpha k \quad (1.9)$$

La dispersión sigue el mismo comportamiento parabólico de una partícula libre más un corrimiento en \mathbf{k} . En la Figura 1.4 se muestra la dispersión electrónica descrita en (1.9). Es importante notar que a un valor dado de energía E le corresponden dos estados con espín y momento distinto.

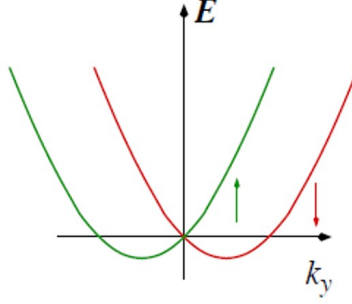


Figura 1.4: Dispersión electrónica de un 2DEG bajo RSOC para $k_x = 0$. Nótese que el RSOC rompe la degeneración de espín en momento ya que a un valor dado de energía E le corresponden dos valores diferentes de \mathbf{k} . Ref. [3]

Este tipo de SOC ha recibido mucha atención en las últimas décadas ya que se ha demostrado que el término α es modulable por medio de sustratos o campos eléctricos externos que alteren la forma del potencial de confinamiento. [3] Sin embargo, el aspecto más llamativo del acoplamiento espín-órbita de Rashba es que rompe la degeneración de espín en ausencia de campo magnético. Este rompimiento de la degeneración de espín se da en momento y no en energía como sucede en el Efecto Zeeman. [32]

En contraste, la presencia de un campo eléctrico perpendicular o interacción con el sustrato en grafeno da origen a un término de Rashba independiente del momento \mathbf{p} pero no del pseudoespín $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$. El Hamiltoniano efectivo de Rashba en la aproximación de un solo valle para grafeno tiene la forma de (1.10).

$$H_R = \frac{\lambda_R}{2} (\mathbf{s} \times \boldsymbol{\sigma})_z \quad (1.10)$$

El parámetro de Rashba λ_R es la intensidad de la interacción debido al campo eléctrico perpendicular o a la interacción con el sustrato. [33] Dependiendo de la interacción con el sustrato, el parámetro de Rashba puede tomar valores entre 13 y 225 meV. [18, 19, 20, 21, 22]

Al renombrar (1.2) como H_0 la dispersión electrónica derivada de $H = H_0 + H_R$ esta dictada por (1.11) [34] donde $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, $\gamma = \hbar v_F$ y el producto de los índices

$\nu\mu = \pm$ corresponden a electrones (+) y huecos (-).

$$E_{\nu,\mu} = \frac{1}{2}\mu\nu \left[\sqrt{\lambda_R^2 + 4\gamma^2 k^2} - \mu\lambda_R \right] \quad (1.11)$$

Los índices ν y μ presentes en (1.11) funcionan como indicadores de la quiralidad de los electrones (o huecos) y la polarización de espín, respectivamente. [35] La gráfica de las dispersiones ayudará a apreciar las diferentes combinaciones de los índices. La gráfica mostrada en la Figura 1.5 corresponde a la dispersión (1.11), donde se ha seleccionado $k_y = 0$. Las líneas punteadas de color negro hacen referencia al caso en el que $\lambda_R = 0$ donde se recupera el espectro energético lineal de H_0 . Además, a energías $E > 0$ ($E < 0$) los colores rojo y azul corresponden a los índices $\nu\mu = +(-)$. Asimismo, la separación en $k_x = 0$ entre estados con índice μ contrario es igual a λ_R .

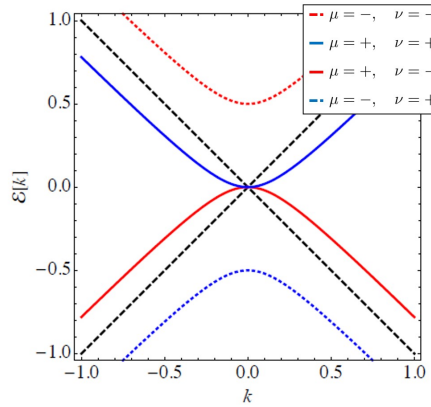


Figura 1.5: Dispersión electrónica de grafeno bajo RSOC para $k_y=0$ con la dispersión lineal (líneas negras punteadas) para el caso en el que $\lambda = 0$. La diferencia entre eigenenergías, por ejemplo entre la dispersión roja y la azul, depende del índice μ y es igual a λ_R . Ref. [3]

En contraste con la Figura 1.4, la Figura 1.5 presenta un corrimiento en energía, mas no en momento. Además, la curvatura de la dispersión indica una generación de masa efectiva resultado del acoplamiento espín-órbita.

La forma explícita para el parámetro de Rashba en grafeno fue derivado por Min et al. [36] a partir de un modelo de amarre fuerte microscópico y teoría de perturbaciones

de segundo orden y esta dado por (1.12). Debe notarse que λ_R es considerada como constante en la red de grafeno prístino.

$$\lambda_R = \frac{eEz_0}{2V_{sp\sigma}}\xi \quad (1.12)$$

En (1.12) ξ es la intensidad del acoplamiento espín-órbita atómico, z_0 es el tamaño atómico del carbono, e es la carga del electrón, E la magnitud del campo eléctrico externo perpendicular a la hoja de grafeno y $V_{sp\sigma}$ es el parámetro de *hopping* de Slater-Koster. Los valores típicos para λ_R son menores a $50 \mu eV$. Sin embargo, como se ha mencionado anteriormente es posible modificar de manera sustancial los valores de λ_R hasta $200 meV$ por medio de efectos de proximidad con sustratos metálicos como Au y Pb.[18, 19, 20, 21, 22]

Más adelante se tendrá que considerar el término de Rashba dependiente de la posición $\lambda_R^{i,j}$. Para esto será necesario determinar cómo las modificaciones a los enlaces carbono-carbono afectan a λ_R . Posteriormente, se podrá utilizar este formalismo para unir al término de Rashba con la distorsión periódica de los enlaces carbono-carbono que caracteriza al patrón Kekulé.

Capítulo 2

Antecedentes

2.1. Grafeno con distorsiones Kekulé: Evidencia experimental

En 2016, Gutiérrez et al. [4] lograron visualizar de manera directa el patrón Kekulé en una monocapa de grafeno. El grupo de investigadores depositó grafeno mediante deposición química de vapor (CVD) sobre monocristales de Cu(111) y utilizaron microscopia de efecto túnel (STM) con el fin de observar el patrón Kekulé. En la Figura 2.1a (izq.) se muestra una imagen topográfica de STM en la que se identifica una mayor densidad electrónica en enlaces con forma Y invertida. Los autores del estudio adjudican la formación de esta patrón a las vacancias de Cu que deforman localmente la red de grafeno como si fuesen adátomos.

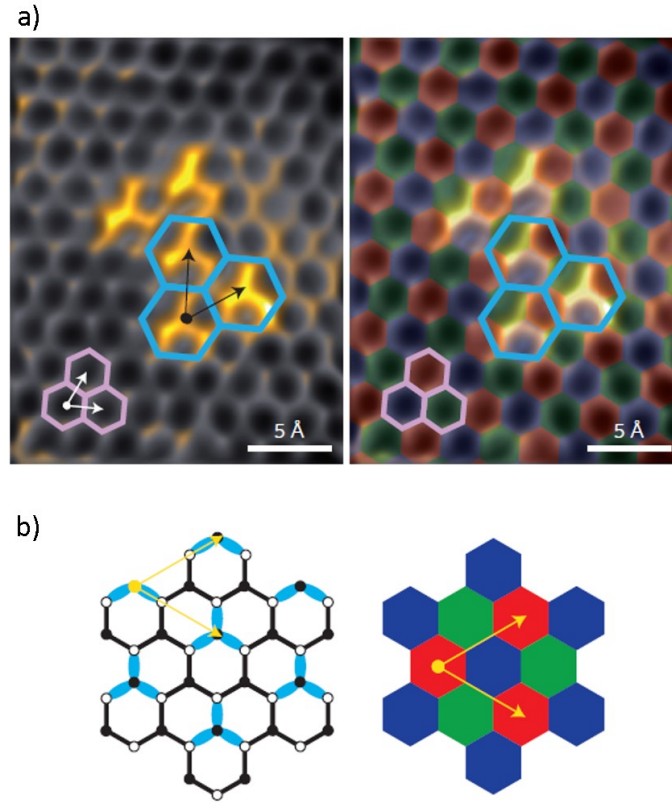


Figura 2.1: a) Imagen de STM donde se identifican la celda original en morado y la nueva supercelda en azul. Asimismo se muestran los vectores de la red directa correspondientes a la red prístina (en blanco) y a la nueva red (en negro). b) Diagrama del patrón Kek-Y donde los enlaces azules indican un acortamiento de la distancia carbono-carbono y se incluyen los nuevos vectores de la red. Además, se presenta un mosaico de colores que permite identificar hexágonos equivalentes y denota la nueva supercelda. Ref. [4]

En la Figura 2.1a (der.) se utiliza un patrón de colores para identificar los hexágonos de grafeno equivalentes. Asimismo, se muestran los vectores que corresponderían a esta nueva supercelda. De manera complementaria, Gutiérrez et al. confirmaron la presencia del patrón KD por medio de imágenes espectroscópicas obtenidas simultáneamente (mapa dI/dV), transformación de Fourier (FT) de las imágenes topográficas y por medio de estructura fina de absorción de rayos X (NEXAFS). El grupo encontró la presencia de dos longitudes distintas de enlace C-C. Dichas pruebas confirmaron

la obtención de grafeno con un patrón Kekulé en forma de Y, Kek-Y de ahora en adelante, que se muestra esquemáticamente en la Figura 2.1b.

A pesar de no haberse obtenido de manera experimental, existe la posibilidad de otra textura Kekulé. Es más, el modelo teórico derivado por C. Chamón [2] considera esta otra textura a la cual se referirá de ahora en adelante como Kek-O. La razón de estos nombres es más clara en la Figura 2.2 donde se muestra la red prístina de grafeno y las texturas Kek-O y Kek-Y, A, B y C respectivamente.

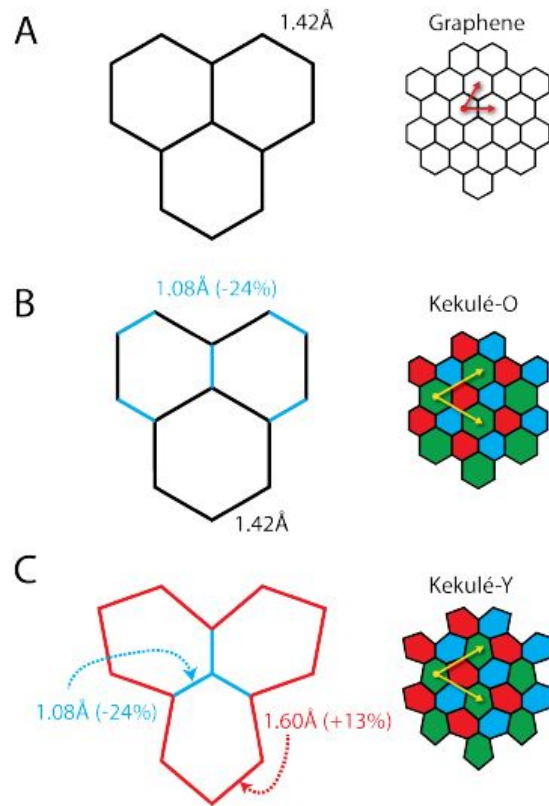


Figura 2.2: Diagrama esquemático de la red de grafeno prístino (A), textura Kek-O (B) y textura Kek-Y (C). Los enlaces negros corresponden a la distancia carbono-carbono $a_0 = 1.42\text{\AA}$ mientras que los enlaces rojos y azules corresponden a enlaces acortados 24% y alargados 13%, respectivamente. Además, cada esquemático cuenta a su derecha con una sección de la red. Las texturas Kekulé presentan un mosaico de colores que identifica hexágonos similares junto a los nuevos vectores (amarillos) de la supercelda de Kekulé. Ref. [5]

En la Figura 2.2A se muestra la red del grafeno prístino con la distancia carbono-carbono $a_0 = 1.42\text{\AA}$ y vectores (rojos) directos. Igualmente, las Figuras 2.2 B y C muestran la red de grafeno con texturas Kek-O y Kek-Y, respectivamente. En estas redes se utilizan enlaces azules para denotar distancias carbono-carbono acortados 24 % mientras que los enlaces rojos corresponden a un alargamiento de 13 %. A pesar de que la red de grafeno luce diferente dependiendo de la textura Kekulé, el mosaico de colores que denota hexágonos equivalentes es igual para ambas texturas. Asimismo, los vectores de la nueva red de grafeno con textura Kekulé son los mismos y ambas texturas se pueden representar con la misma supercelda tanto en el espacio directo como en el espacio recíproco.

En la siguiente sección se revisará el modelo teórico que describe ambas texturas y determina la estructura de bandas del sistema considerando solamente la deformación de la red de grafeno.

2.2. Grafeno con distorsion Kekulé: Modelo teórico

A raíz de la obtención experimental de grafeno con patrón Kek-Y, Gamayun et al. [6] derivaron un Hamiltoniano de Dirac que describe la dispersión energética de dicho sistema partiendo del término (1.6) derivado por C. Chamon [2]. El término (2.1) engloba las dos posibles texturas Kekulé(Kek-Y y Kek-O).

$$\frac{\delta t_{i,j}}{t^{(0)}} = \Delta e^{i(p\mathbf{K}_+ + q\mathbf{K}_-) \cdot \boldsymbol{\delta}_j + i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} + H.c. \quad (2.1)$$

La magnitud que describe la modificación a la energía de *hopping* esta dada por $\Delta = -i\alpha\bar{\epsilon} - \frac{\alpha^2}{2}\epsilon^2$ donde α es una constante y ϵ es el vector de desplazamiento efectivo de la red, $\mathbf{G} = \mathbf{K}_+ - \mathbf{K}_-$ es el vector recíproco de la nueva red recíproca, $\mathbf{r} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2$ con $n, m \in \mathbb{Z}$ es un vector directo de la red prístina y $\boldsymbol{\delta}_j$ con $j = 1, 2, 3$ es el vector que une a un átomo de carbono con uno de sus 3 vecinos cercanos. Esta forma generalizada (2.1) permite identificar las diferentes texturas Kekulé por medio del índice $\nu = (1 + q - p) \bmod 3$ con $p, q \in \mathbb{Z}_3$. Los tres patrones de la distorsión

Kekulé, Kek-O ($\nu = 0$) y Kek-Y ($\nu = \pm 1$), se muestran en la Figura 2.3 junto a la nueva red recíproca del grafeno cuyos vectores recíprocos son \mathbf{K}_{\pm} . Asimismo, se delimita la nueva zona de Brillouin reducida con un hexágono amarillo.

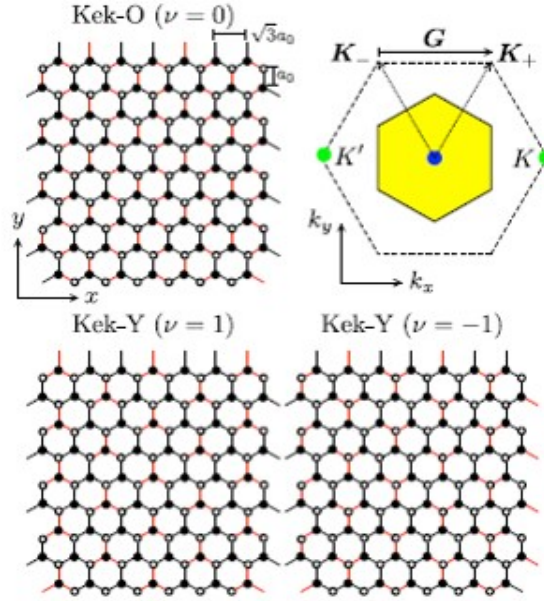


Figura 2.3: Diagramas esquemáticos de las texturas Kekulé en grafeno Kek-O ($\nu = 0$) y Kek-Y ($\nu = \pm 1$). Los enlaces rojos y negros denotan distancias de enlace diferentes. En la esquina superior derecha se muestra la nueva celda unitaria recíproca y la zona de Brillouin reducida (hexágono amarillo) que comparten las tres texturas. Ref. [6]

Para el patrón Kek-Y ($\nu = 1$) a bajas energías el grupo de investigadores derivó el Hamiltoniano (2.2) en la base $\Psi_{\mathbf{k}} = (-b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}})^T$ que presenta un término que acopla el valle $\boldsymbol{\tau}$ con el momento \mathbf{p} de la forma $\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{p}$ además del ya conocido término de acoplamiento entre momento y pseudoespín $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}$.

$$H = v_{\sigma} \tau_0 \otimes (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) + v_{\tau} (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\tau}) \otimes \sigma_0 \quad (2.2)$$

Gamayun et al. definen las velocidades $v_{\sigma} = v_F$ y $v_{\tau} = \Delta_0 v_F$. Cada término va acompañado de una matriz unitaria σ_0/τ_0 que actúa sobre el grado de libertad de pseudoespín/valle. A partir de (2.2) se derivan las eigenenergías para el patrón Kek-Y mostradas en (2.3), con índices $\sigma = +$ para electrones y $\sigma = -$ para huecos.

La dispersión energética resultante presenta dos conos con pendiente distinta para electrones ($\sigma = +$) y para huecos ($\sigma = -$) debido a las dos velocidades $v_0(1 \pm \Delta_0)$.

$$E(k)_\sigma = \sigma v_0(1 \pm \Delta_0)|\mathbf{p}| \quad (2.3)$$

La Figura 2.4 muestra las dispersiones dadas por (2.3) para un valor de $\Delta_0 = 0.1$. Por esta razón, Gamayun et al. concluyen que por sí solo el patrón Kek-Y no abre un brecha en la estructura de bandas del grafeno. Los autores grafican la dispersión energética para la textura Kek-O ($\nu = 0$) como referencia.

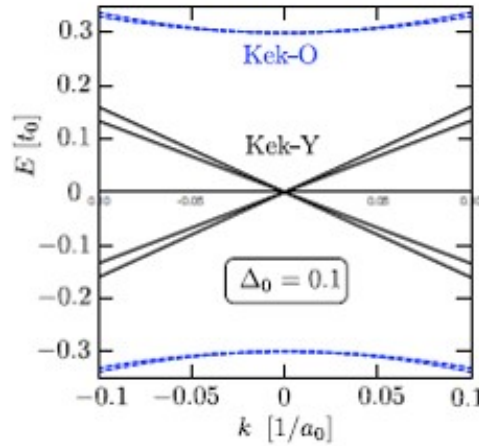


Figura 2.4: Dispersión energética para grafeno con textura Kek-Y ($\nu = 1$) con un valor dado de $\Delta_0 = 0.1$. Para el caso Kek-Y, se mantiene el comportamiento lineal de los electrones en grafeno. Sin embargo, se rompe la degeneración en valle y se producen dos conos (para $\sigma = \pm$) con pendientes $v_0(1 \pm \Delta_0)$. La dispersión de la textura Kek-O ($\nu = 0$) es graficada como referencia y mantiene la degeneración en valle mientras que presenta una brecha de energía. Ref. [6]

En la Figura 2.4 se observan que el comportamiento lineal de los portadores de carga se mantienen en el grafeno con textura Kek-Y. Sin embargo, se rompe la degeneración en valle y a cada cono le corresponde una pendiente $v_0(1 \pm \Delta_0)$. A pesar de no ser obtenido experimentalmente, los autores grafican la dispersión de la textura Kek-O. Dicha dispersión presenta degeneración en valle y una brecha energética.

Aún considerando la dispersión mostrada anteriormente, Gamayun et al. no descartan la existencia de una brecha en el espectro del arreglo experimental de Gutierrez. Esto debido a que es posible que la simetría de la subred haya sido rota por un potencial iónico con origen en la red de Cu subyacente.

En la siguiente sección se discutirá la dependencia del parámetro de Rashba con respecto a la distancia de enlace. Esta discusión permitirá unir más adelante los dos fenómenos que son estudiados en este trabajo; la distorsión Kekulé y el efecto espín-órbita de Rashba.

2.3. Efecto Rashba inducido por deformaciones en grafeno

Al considerar deformaciones arbitrarias uniformes de la red de grafeno, Berche et al. [7] estudiaron el efecto que tienen dichas distorsiones sobre el parámetro de Rashba que se vuelve dependiente de la posición y calcularon la dispersión electrónica resultante. Una deformación de la red modifica el término $V_{sp\sigma}$ de (1.12) que acopla el orbital s de un átomo de carbono con los orbitales p_x y p_y del átomo de carbono vecino debido al cambio en la distancia carbono-carbono dado por $\frac{|\delta_j|}{a} - 1$. Para modelar dicha dependencia del parámetro de Rashba con respecto a la nueva distancia carbono-carbono es de ayuda redefinir (1.12) como (2.4a), donde los superíndices (0) denotan a los parámetros de la red de grafeno prístina. Además, Berche et al. modelaron la razón adimensional $\tau_j^{sp\sigma}$ como se muestra en (2.4b).

$$\lambda_R = \lambda_R^{(0)} \frac{V_{sp\sigma}^{(0)}}{V_{sp\sigma}} = \lambda_R^{(0)} \tau_j^{sp\sigma} \quad (2.4a)$$

$$\tau_j^{sp\sigma} = e^{\gamma(\frac{|\delta_j|}{a} - 1)} e^{\kappa(\frac{|\delta_j|}{a} - 1)^2} \quad (2.4b)$$

Berche et al. también calcularon cómo es que el término t_j se ve modificado por el cambio en la distancia carbono-carbono y determinaron la expresión mostrada en

(2.5), donde β es una constante.

$$t_j = t^{(0)} e^{-\beta\left(\frac{|\delta_j|}{a} - 1\right)} \quad (2.5)$$

Para visualizar el comportamiento de los parámetros $t_j/t^{(0)}$ y $\lambda_R/\lambda_R^{(0)}$ en función de $\xi \equiv \frac{|\delta_j|}{a}$ es de ayuda referirse a la Figura 2.5.

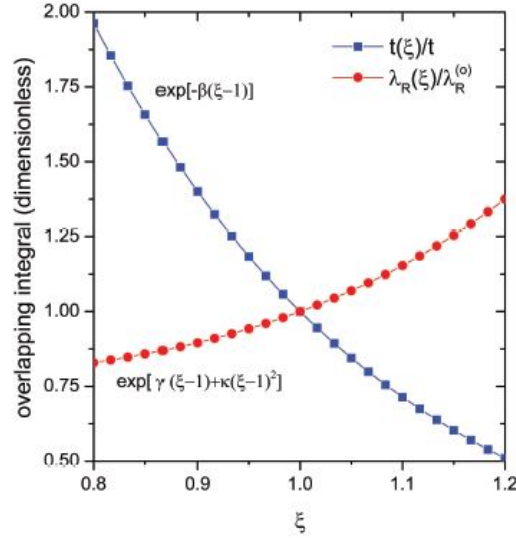


Figura 2.5: Comportamiento de los parámetros $t_j(\xi)/t^{(0)}$ y $\lambda_R(\xi)/\lambda_R^{(0)}$ con respecto a $\xi = \frac{|\delta_j|}{a_0}$. Mientras que $t_j(\xi)/t^{(0)}$ decrece a manera que la deformación ξ aumenta, $\lambda_R(\xi)/\lambda_R^{(0)}$ aumenta a manera que ξ aumenta. Ref.[7]

Para valores de $\xi > 1$, i.e. alargamientos de la distancia de enlace, la intensidad del parámetro de Rashba aumenta mientras que la energía de *hopping* disminuye. El caso contrario de valores de $\xi < 1$, i.e. una contracción del enlace, es la energía de *hopping* la que aumenta mientras la intensidad del parámetro de Rashba decrece. El valor de $t_j(\xi)/t^{(0)}$ depende de la distancia de enlace en medida que aumenta o decrece el solapamiento de las funciones de onda de los electrones. Por otro lado, el valor de $\lambda_R(\xi)/\lambda_R^{(0)}$ depende inversamente del término de acoplamiento $V_{sp\sigma}$ que aumenta o decrece en función de la distancia carbono-carbono.

Finalmente, la Figura 2.6 muestra las dispersiones electrónicas de grafeno bajo acoplamiento espín-órbita de Rashba y deformaciones de la red con valores $\gamma = 1.265$,

$\kappa = 1.642$ y $\beta = 3.37$. Asimismo, se grafican diferentes valores de una deformación uniaxial de la red ε para un valor de $\lambda_R^{(0)} = 0.024$ eV.

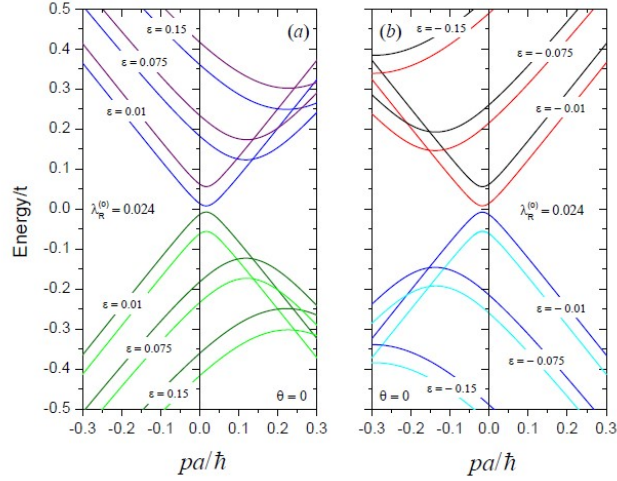


Figura 2.6: Dispersión energética de grafeno bajo acoplamiento espín-órbita de Rashba y en presencia de deformación uniaxial ε . A medida que la deformación ε aumenta, también aumenta la brecha de energía entre electrón y hueco mientras que la separación entre estados de espín contrario se mantiene constante. Asimismo, las dispersiones se corren en momento si ε denota una contracción o un estiramiento de la red de grafeno. Ref. [7]

Además de la separación en energía de estados con espín contrario típica del acoplamiento espín-órbita de Rashba en grafeno, la Figura 2.6 muestra un corrimiento en momento dependiente del valor y si la deformación ε es una contracción o un estiramiento de la red de grafeno. Asimismo, se induce una brecha entre electrón y hueco que aumenta a medida que ε aumenta.

Dado que la dispersión electrónica del grafeno con acoplamiento espín-órbita de Rashba puede ser modificada por una deformación de la red, resulta natural preguntarse el efecto que tendría la textura Kekulé. Con el término de Rashba dependiente de la posición modelado mediante (2.4a) y (2.4b) en donde la deformación de la distancia de enlace $\xi - 1$ es el parámetro de importancia, en secciones siguientes se hará la conexión con la deformación de la distancia de enlace causada por el patrón Kekulé.

Capítulo 3

Hipótesis y Objetivos

3.1. Hipótesis

La inducción de un acoplamiento espín-órbita de Rashba en un sistema de grafeno con distorsiones Kekulé resultará en un Hamiltoniano efectivo que acopla los tres grados de libertad del electrón en el grafeno; el espín, el pseudoespín y el valle. Se anticipa que el Hamiltoniano derivado conducirá a dispersiones electrónicas y orientaciones de espín, pseudoespín y valle que mostrarán los efectos conjuntos del patrón Kekulé en cuestión y el acoplamiento espín-órbita de Rashba; lo que reforzará la interpretación de los términos de acoplamiento entre los 3 grados de libertad .

3.2. Objetivos

3.2.1. Objetivo General

Realizar un estudio sistemático dentro del formalismo de amarre fuerte el sistema de grafeno con distorsiones Kekulé y acoplamiento espín-órbita de Rashba inducidos por proximidad con sustratos metálicos.

3.2.2. Objetivos específicos

a) Determinar la relación entre la deformación de la distancia carbono-carbono producto de la distorsión Kekulé y el parámetro de Rashba dependiente de la posición.

b) Derivar el Hamiltoniano efectivo para el sistema de grafeno con distorsiones Kekulé y acoplamiento espín órbita de Rashba.

c) Calcular las dispersiones electrónicas del sistema por medio de las eigenenergías derivadas del Hamiltoniano efectivo.

d) Calcular las orientaciones de espín, pseudoespín e valle a través de los eigenvectores derivados del Hamiltoniano efectivo.

Capítulo 4

Derivación del Hamiltoniano efectivo

4.1. Hamiltoniano: modelo en amarre fuerte

En la Figura 4.1a se muestra la red de grafeno a partir de la cual parte este estudio. La red está definida por los vectores directos $\boldsymbol{\delta}_1 = \frac{1}{2}(\sqrt{3}, -1)$, $\boldsymbol{\delta}_2 = -\frac{1}{2}(\sqrt{3}, 1)$, $\boldsymbol{\delta}_3 = (0, 1)$, $\mathbf{a}_1 = \boldsymbol{\delta}_3 - \boldsymbol{\delta}_1$, $\mathbf{a}_2 = \boldsymbol{\delta}_3 - \boldsymbol{\delta}_2$, $\mathbf{r} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2$ ($n, m \in \mathbb{Z}$). En este sistema, se define la distancia carbono-carbono $a_0 \equiv 1$, los átomos A en los sitios i con vector de posición \mathbf{r} y los átomos B en los sitios j con vector de posición $\mathbf{r} + \boldsymbol{\delta}_j$. Asimismo, en la Figura 4.1b, se muestra la celda unitaria en el espacio recíproco donde los vectores recíprocos que corresponden a los puntos K y K' en las esquinas de la primera zona de Brillouin (hexágono amarillo) respectivamente son $\mathbf{K}_{\pm} = \frac{2\pi}{9}\sqrt{3}(\pm 1, \sqrt{3})$.

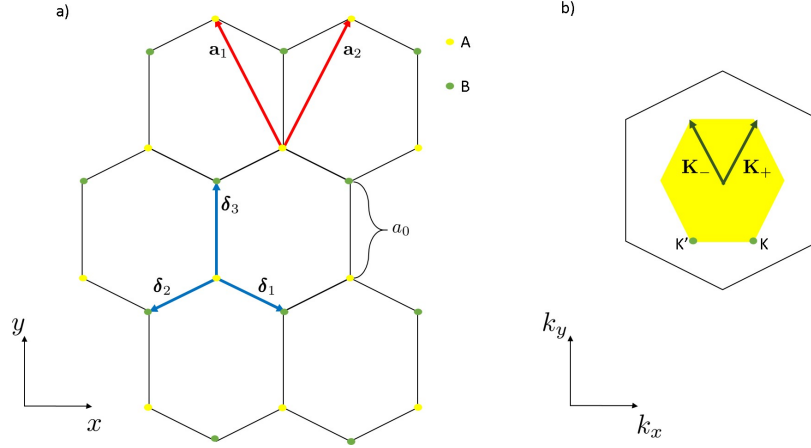


Figura 4.1: Diagramas esquemáticos de a) la red directa de grafeno y b) la celda unitaria en el espacio recíproco. Los vectores de la red directa \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 recorren las subred A(B) mientras que los vectores a los primeros vecinos $\boldsymbol{\delta}_j$, $j = 1, 2, 3$ conectan un átomo A con los tres átomos B circundantes. Los vectores recíprocos asociados a los puntos K y K' en las esquinas de la primera zona de Brillouin (hexágono amarillo) son \mathbf{K}_\pm , respectivamente.

El Hamiltoniano de amarre fuerte total para este sistema de grafeno con interacción espín-órbita de Rashba (RSOC de ahora en adelante) en el espacio directo se muestra en (4.1). El término $t_{i,j}$ corresponde a la energía de *hopping* mientras que el término $\lambda_R^{i,j}$ es la magnitud del RSOC entre un átomo en el sitio i y cada uno de sus 3 primeros vecinos j . El vector de espín $\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ se encuentra expresado en términos de las matrices de Pauli y el vector unitario $\hat{\boldsymbol{\delta}}_{ij}$ apunta al sitio j desde el sitio i . Los índices $\eta = \mu = \uparrow, \downarrow$ denotan elementos de matriz en términos de las matrices de Pauli de espín (real).

$$H = - \sum_{\langle i,j,\eta \rangle} (t_{i,j} a_i^{\eta\dagger} b_j^\eta + H.c.) + \frac{i}{\hbar} \sum_{\langle i,j,\eta \neq \mu \rangle} (\lambda_R^{i,j} a_i^{\eta\dagger} [(\mathbf{s} \times \hat{\boldsymbol{\delta}}_{ij})_z]_{\eta,\mu} b_j^\mu - H.c.) \quad (4.1)$$

En el lenguaje de la segunda cuantización, el operador a_i^η/b_j^ν aniquila un electrón el sitio i/j de la subred A/B con espín η/ν mientras que el hermitiano conjugado (\dagger) de dicho operador crea un electrón en su respectivo sitio con el espín correspondiente. Esta aniquilación/creación se encuentra pesada en la primer sumatoria de (4.1) por

el término $t_{i,j}$ y por $\lambda_R^{i,j}$ en la segunda sumatoria. Ambos términos son dependientes de la posición, lo que se aprovechará al momento de modelar la distorsión Kekulé. Finalmente, los términos de la segunda sumatoria también se encuentran pesados por la componente z del producto cruz entre los vectores \mathbf{s} y $\hat{\boldsymbol{\delta}}_{ij}$.

Con el fin de obtener la estructura de bandas del sistema en función del momento, es necesario realizar el mapeo desde el espacio directo al espacio recíproco. Para esto se realiza la descomposición de Fourier de los operadores de creación/anihilación con lo que se obtiene el Hamiltoniano en el espacio recíproco mostrado en (4.2). Nótese que el vector $\hat{\boldsymbol{\delta}}_{ij} \rightarrow \hat{\boldsymbol{\delta}}_j$ ya que la sumatoria en (4.2) se hace sobre los primeros vecinos j del sitio i .

$$H(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k} < \eta >} \sum_{j=1}^3 (t_j e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_j} a_{\mathbf{k}}^{\eta\dagger} b_{\mathbf{k}}^{\eta} + H.c.) + \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k} < \eta \neq \mu >} \sum_{j=1}^3 (\lambda_R^j e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_j} a_{\mathbf{k}}^{\eta\dagger} b_{\mathbf{k}}^{\mu} [(\mathbf{s} \times \hat{\boldsymbol{\delta}}_j)_z]_{\eta, \mu} - H.c.) \quad (4.2)$$

El parámetro que describe la textura Kekulé tiene la forma de (4.3) donde $p, q \in \mathbb{Z}_3$ y el vector de onda Kekulé se define como $\mathbf{G} = \mathbf{K}_+ - \mathbf{K}_- = \frac{4\pi}{9} \sqrt{3}(1, 0)$.

$$\frac{t_j}{t^{(0)}} = 1 + 2Re[\Delta e^{i(p\mathbf{K}_+ + q\mathbf{K}_-) \cdot \boldsymbol{\delta}_j + i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}] \quad (4.3)$$

Por otro lado, el parámetro que describe la variación del acoplamiento espín-órbita del tipo Rashba con respecto a la variación de la distancia a_0 tiene la forma genérica de (4.4).

$$\lambda_R^j = \lambda_R^{(0)} e^{\gamma(\frac{|\boldsymbol{\delta}_j|}{a_0} - 1)} e^{\kappa(\frac{|\boldsymbol{\delta}_j|}{a_0} - 1)^2} \quad (4.4)$$

Al expandir a segundo orden (4.4) y manteniendo solo los términos lineales y cuadráticos de $(\frac{|\boldsymbol{\delta}_j|}{a_0} - 1)$ en concordancia con (4.3), obtenemos (4.5) donde $\xi = i\gamma\bar{\epsilon} - (\kappa + \frac{\gamma^2}{2})\epsilon^2$, γ y κ son constantes y ϵ es el vector de desplazamiento efectivo de la red.

$$\frac{\lambda_R^j}{\lambda_R^{(0)}} = 1 + 2Re[\xi e^{i(p\mathbf{K}_+ + q\mathbf{K}_-) \cdot \boldsymbol{\delta}_j + i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}] \quad (4.5)$$

Con el fin de sustituir (4.3) y (4.5) en (4.2) se utilizó la propiedad $e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}c_{\mathbf{k}} = c_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}$ de los operadores de aniquilación/creación. Además, al definir $\varepsilon(\mathbf{k}) = t^{(0)} \sum_{j=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_j}$ y $\varepsilon_R^{\eta,\mu}(\mathbf{k}) = \frac{\lambda_R^{(0)}}{\hbar} \sum_{j=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_j} [(\mathbf{s} \times \hat{\boldsymbol{\delta}}_j)_z]_{\eta,\mu}$ con $\eta, \nu = \uparrow, \downarrow$, se obtiene (4.6).

$$H(\mathbf{k}) = H_0(\mathbf{k}) + H_R(\mathbf{k}) \quad (4.6a)$$

$$H_0(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k} \langle \eta \rangle} (-\varepsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^{\eta\dagger} b_{\mathbf{k}}^{\eta} - \Delta \varepsilon(\mathbf{k} + p\mathbf{K}_+ + q\mathbf{K}_-) a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\eta\dagger} b_{\mathbf{k}}^{\eta} - \Delta^* \varepsilon(\mathbf{k} - p\mathbf{K}_+ - q\mathbf{K}_-) a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\eta\dagger} b_{\mathbf{k}}^{\eta} + H.c.) \quad (4.6b)$$

$$H_R(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k} \langle \eta \neq \mu \rangle} i(\varepsilon_R^{\eta,\mu}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^{\eta\dagger} b_{\mathbf{k}}^{\mu} + \xi \varepsilon_R^{\eta,\mu}(\mathbf{k} + p\mathbf{K}_+ + q\mathbf{K}_-) a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\eta\dagger} b_{\mathbf{k}}^{\mu} + \xi^* \varepsilon_R^{\eta,\mu}(\mathbf{k} - p\mathbf{K}_+ - q\mathbf{K}_-) a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\eta\dagger} b_{\mathbf{k}}^{\mu} - H.c.) \quad (4.6c)$$

Nótese el paralelismo entre los elementos $\varepsilon(\mathbf{k})$ y $\varepsilon_R^{\eta,\mu}(\mathbf{k})$. Con la excepción de constantes como $t^{(0)}$ y $\lambda_R^{(0)}$, las amplitudes Δ y ξ y el producto de $(\mathbf{s} \times \hat{\boldsymbol{\delta}}_j)_z$, los elementos $\varepsilon(\mathbf{k})$ y $\varepsilon_R^{\eta,\mu}(\mathbf{k})$ se comportan de la misma manera debido al término $\sum_{j=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_j}$. Este paralelismo facilitará el tratamiento de ambos términos en las secciones siguientes.

4.2. Expansión de la base del Hamiltoniano en espacio recíproco

El siguiente paso es expandir la base al evaluar el Hamiltoniano (4.6) en $\mathbf{k} \pm \mathbf{G}$ con el fin de incluir los elementos $c_{\mathbf{k} \pm \mathbf{G}}$. Además, se hará el cambio de notación al índice ν . Sin embargo, antes de continuar vale la pena considerar los siguientes relaciones entre vectores directos y recíprocos.

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\pm} \cdot \boldsymbol{\delta}_1 &= \frac{\pi}{9} \sqrt{3} (\pm\sqrt{3} - \sqrt{3}) = \frac{\pi}{3} (\pm 1 - 1) = \begin{cases} 0 & , \text{para } \mathbf{K}_+ \\ -\frac{2\pi}{3} & , \text{para } \mathbf{K}_- \end{cases} \\ \mathbf{K}_{\pm} \cdot \boldsymbol{\delta}_2 &= -\frac{\pi}{9} \sqrt{3} (\pm\sqrt{3} + \sqrt{3}) = -\frac{\pi}{3} (\pm 1 + 1) = \begin{cases} -\frac{2\pi}{3} & , \text{para } \mathbf{K}_+ \\ 0 & , \text{para } \mathbf{K}_- \end{cases} \\ \mathbf{K}_{\pm} \cdot \boldsymbol{\delta}_3 &= \frac{2\pi}{3} \end{aligned}$$

$$\mathbf{G} \cdot \boldsymbol{\delta}_1 = \frac{2\pi}{9} \sqrt{3}(\sqrt{3}) = \frac{2\pi}{3}$$

$$\mathbf{G} \cdot \boldsymbol{\delta}_2 = -\frac{2\pi}{9} \sqrt{3}(\sqrt{3}) = -\frac{2\pi}{3}$$

$$\mathbf{G} \cdot \boldsymbol{\delta}_3 = 0$$

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{r} = \mathbf{G} \cdot (n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2) = \mathbf{G} \cdot ((n+m)\boldsymbol{\delta}_3 - n\boldsymbol{\delta}_1 - m\boldsymbol{\delta}_2) = \frac{2\pi}{3}(m-n), \quad n, m \in \mathbb{Z}$$

Con estas relaciones es posible obtener las identidades mostradas en (4.7), las cuales se demuestran en el Apéndice 7.1. Cabe resaltar que estas identidades son igualmente válidas para los términos $\varepsilon_R^{\eta,\mu}(\mathbf{k})$ ya que su aplicación concierne solamente al exponente de $e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_j}$.

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k} + 3n\mathbf{K}_\pm) = e^{in\frac{2\pi}{3}} \varepsilon(\mathbf{k} + n(\mathbf{K}_+ + \mathbf{K}_-)), \quad n \in \mathbb{Z} \quad (4.7)$$

Con (4.7) a la mano, es posible reescribir (4.6) como se muestra a continuación.

$$\begin{aligned} H_0(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k} < \eta >} -[\varepsilon(\mathbf{k})a_{\mathbf{k}}^{\eta\dagger}b_{\mathbf{k}}^\eta + \Delta e^{i\frac{2\pi}{3}(p+q)}\varepsilon(\mathbf{k} + p\mathbf{K}_+ + q\mathbf{K}_- + (p+q)(\mathbf{K}_+ + \mathbf{K}_-) - \\ &\quad 3p\mathbf{K}_+ - 3q\mathbf{K}_-)a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\eta\dagger}b_{\mathbf{k}}^\eta + \Delta^* e^{-i\frac{2\pi}{3}(p+q)}\varepsilon(\mathbf{k} - p\mathbf{K}_+ - q\mathbf{K}_- - (p+q)(\mathbf{K}_+ + \mathbf{K}_-) + \\ &\quad 3p\mathbf{K}_+ + 3q\mathbf{K}_-)a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\eta\dagger}b_{\mathbf{k}}^\eta + H.c.] \\ H_R(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k} < \eta \neq \mu >} i[\varepsilon_R^{\eta,\mu}(\mathbf{k})a_{\mathbf{k}}^{\eta\dagger}b_{\mathbf{k}}^\mu + \xi e^{i\frac{2\pi}{3}(p+q)}\varepsilon_R^{\eta,\mu}(\mathbf{k} + p\mathbf{K}_+ + q\mathbf{K}_- + (p+q)(\mathbf{K}_+ + \\ &\quad \mathbf{K}_-) - 3p\mathbf{K}_+ - 3q\mathbf{K}_-)a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\eta\dagger}b_{\mathbf{k}}^\mu + \xi^* e^{-i\frac{2\pi}{3}(p+q)}\varepsilon_R^{\eta,\mu}(\mathbf{k} - p\mathbf{K}_+ - q\mathbf{K}_- - (p+q)(\mathbf{K}_+ + \\ &\quad \mathbf{K}_-) + 3p\mathbf{K}_+ + 3q\mathbf{K}_-)a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\eta\dagger}b_{\mathbf{k}}^\mu - H.c.] \end{aligned}$$

En la notación del índice ν reescribimos el resultado anterior como se muestra a continuación. Se ha definido $\tilde{\Delta} = \Delta e^{i\frac{2\pi}{3}(p+q)}$ y $\tilde{\xi} = \xi e^{i\frac{2\pi}{3}(p+q)}$.

$$\begin{aligned} H_0(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k} < \eta >} -[\varepsilon(\mathbf{k})a_{\mathbf{k}}^{\eta\dagger}b_{\mathbf{k}}^\eta + \underbrace{\tilde{\Delta}\varepsilon(\mathbf{k} + (q-p)\mathbf{K}_+ + (p-q)\mathbf{K}_-)}_{(\nu-1)\mathbf{G}}a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\eta\dagger}b_{\mathbf{k}}^\eta + \tilde{\Delta}^*\varepsilon(\mathbf{k} + \\ &\quad \underbrace{(p-q)\mathbf{K}_+ + (q-p)\mathbf{K}_-}_{(1-\nu)\mathbf{G}})a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\eta\dagger}b_{\mathbf{k}}^\eta + H.c.] \\ H_R(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k} < \eta \neq \mu >} i[\varepsilon_R^{\eta,\mu}(\mathbf{k})a_{\mathbf{k}}^{\eta\dagger}b_{\mathbf{k}}^\mu + \tilde{\xi}\varepsilon_R^{\eta,\mu}(\mathbf{k} + \underbrace{(q-p)\mathbf{K}_+ + (p-q)\mathbf{K}_-}_{(\nu-1)\mathbf{G}})a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\eta\dagger}b_{\mathbf{k}}^\mu + \\ &\quad \tilde{\xi}^*\varepsilon_R^{\eta,\mu}(\mathbf{k} + \underbrace{(p-q)\mathbf{K}_+ + (q-p)\mathbf{K}_-}_{(1-\nu)\mathbf{G}})a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\eta\dagger}b_{\mathbf{k}}^\mu - H.c.] \end{aligned}$$

Los resultados de evaluar (4.6) en $\mathbf{k} \pm \mathbf{G}$ se muestra en el Apéndice 7.2, donde se utilizaron tanto las identidades de (4.7) como el 1 conveniente $e^{\pm i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} = e^{\pm i3\frac{2\pi}{3}(m-n)} = e^{\pm i2\pi(m-n)}$ con el fin de escribir los elementos del Hamiltoniano extendido en términos del índice ν . En la siguiente sección se usará la forma matricial de dicho Hamiltoniano y se explotarán las simetrías resultantes de la base elegida.

4.3. Forma matricial del Hamiltoniano en espacio reíproco

La base de espín $c_{\mathbf{k}} = (a_{\mathbf{k}}^{\uparrow}a_{\mathbf{k}}^{\downarrow} a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\uparrow}a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\downarrow}a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\uparrow}a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\downarrow}b_{\mathbf{k}}^{\uparrow} b_{\mathbf{k}}^{\downarrow}b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\uparrow}b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\downarrow}b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\uparrow}b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\downarrow})^T$ permite escribir el Hamiltoniano total como (4.8a), donde H es una matriz de 12x12. Dado que los términos de la matriz \mathcal{E}_{3x3} son independientes de espín, se utiliza s_0 como la matriz identidad de espín de 2×2 como se observa en (4.8b) donde se han renombrado los términos $\varepsilon(n)$ como ε_n .

$$\mathbb{H} = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} H c_{\mathbf{k}}, \quad H = H_0 + H_R \quad (4.8a)$$

$$H_0 = - \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{E} \\ \mathcal{E}^{\dagger} & 0 \end{pmatrix} \otimes s_0, \quad \mathcal{E} = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & \tilde{\Delta}\varepsilon_{\nu+1} & \tilde{\Delta}^*\varepsilon_{-\nu-1} \\ \tilde{\Delta}^*\varepsilon_{1-\nu} & \varepsilon_1 & \tilde{\Delta}\varepsilon_{\nu} \\ \tilde{\Delta}\varepsilon_{\nu-1} & \tilde{\Delta}^*\varepsilon_{-\nu} & \varepsilon_{-1} \end{pmatrix} \quad (4.8b)$$

Una matriz análoga resulta para H_R al agrupar los elementos $\varepsilon_R^{\eta,\mu}(\mathbf{k} + n\mathbf{G})$ renombrados como $\varepsilon_{R,n}^{\eta,\mu}$ en las matrices 2×2 $\boldsymbol{\varepsilon}_{R,n}$ como se muestra en (4.9). Sin embargo, hay que determinar los elementos de las matrices $\boldsymbol{\varepsilon}_{R,n}$. En el caso de los escalares de \mathcal{E} los cuales son diagonales en espín, bastó con multiplicar cada elemento por la matriz identidad de espín. Este no es el caso de los elementos de $\boldsymbol{\varepsilon}_{R,n}$.

$$H_R = i \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\varepsilon}_R \\ -\boldsymbol{\varepsilon}_R^{\dagger} & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_R = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_{R,0} & \tilde{\xi}\boldsymbol{\varepsilon}_{R,\nu+1} & \tilde{\xi}^*\boldsymbol{\varepsilon}_{R,-\nu-1} \\ \tilde{\xi}^*\boldsymbol{\varepsilon}_{R,1-\nu} & \boldsymbol{\varepsilon}_{R,1} & \tilde{\xi}\boldsymbol{\varepsilon}_{R,\nu} \\ \tilde{\xi}\boldsymbol{\varepsilon}_{R,\nu-1} & \tilde{\xi}^*\boldsymbol{\varepsilon}_{R-\nu} & \boldsymbol{\varepsilon}_{R,-1} \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

Al reescribir $(\mathbf{s} \times \hat{\boldsymbol{\delta}}_j)_z$ como $\hat{\boldsymbol{\delta}}_j \cdot (-s_y \hat{i} + s_x \hat{j})$ se procede a la expansión a cero orden de $e^{i\mathbf{k} \cdot \hat{\boldsymbol{\delta}}_j}$, lo que mantiene los términos de Rashba independientes del momento. Explícitamente, los elementos de $\varepsilon_{R,\pm n}$ se muestran a continuación.

$$\begin{aligned} \varepsilon_{R,\pm n} &= \frac{\lambda_R^{(0)}}{\hbar} [e^{\pm in \frac{2\pi}{3}} (-\frac{\sqrt{3}}{2} s_y - \frac{1}{2} s_x) + e^{\mp in \frac{2\pi}{3}} (\frac{\sqrt{3}}{2} s_y - \frac{1}{2} s_x) + s_x] \\ \varepsilon_{R,\pm n} &= \frac{\lambda_R^{(0)}}{\hbar} [s_x \underbrace{(1 - \frac{1}{2} e^{\pm in \frac{2\pi}{3}} - \frac{1}{2} e^{\mp in \frac{2\pi}{3}})}_{\cos(n \frac{2\pi}{3})} + s_y \underbrace{(\frac{\sqrt{3}}{2} e^{\mp in \frac{2\pi}{3}} - \frac{\sqrt{3}}{2} e^{\pm in \frac{2\pi}{3}})}_{\mp i\sqrt{3} \sin(n \frac{2\pi}{3})}] \end{aligned}$$

Gracias a la forma explícita de las matrices de espín $s_{x/y} = \frac{\hbar}{2} \sigma_{x/y}$ es posible expresar los elementos de (4.9) como (4.10).

$$\varepsilon_{R,\pm n} = \frac{\lambda_R^{(0)}}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 - \cos(n \frac{2\pi}{3}) \mp \sqrt{3} \sin(n \frac{2\pi}{3}) \\ 1 - \cos(n \frac{2\pi}{3}) \pm \sqrt{3} \sin(n \frac{2\pi}{3}) & 0 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_{R,n}^{\uparrow\downarrow} \\ \varepsilon_{R,n}^{\downarrow\uparrow} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

Por lo tanto, la forma explícita de (4.8a) en la base $c_{\mathbf{k}}$ se muestra a continuación en (4.11).

$$H = \begin{pmatrix} 0 & g_\nu \\ g_\nu^\dagger & 0 \end{pmatrix}, \quad g_\nu = \begin{pmatrix} -\varepsilon_0 & i\varepsilon_{R,0}^{\uparrow\downarrow} & -\tilde{\Delta}\varepsilon_{\nu+1} & i\tilde{\xi}\varepsilon_{R,\nu+1}^{\uparrow\downarrow} & -\tilde{\Delta}^*\varepsilon_{-\nu-1} & i\tilde{\xi}^*\varepsilon_{R,-\nu-1}^{\uparrow\downarrow} \\ i\varepsilon_{R,0}^{\downarrow\uparrow} & -\varepsilon_0 & i\tilde{\xi}\varepsilon_{R,\nu+1}^{\downarrow\uparrow} & -\tilde{\Delta}\varepsilon_{\nu+1} & i\tilde{\xi}^*\varepsilon_{R,-\nu-1}^{\downarrow\uparrow} & -\tilde{\Delta}^*\varepsilon_{-\nu-1} \\ -\tilde{\Delta}^*\varepsilon_{1-\nu} & i\tilde{\xi}^*\varepsilon_{R,1-\nu}^{\uparrow\downarrow} & -\varepsilon_{-1} & i\varepsilon_{R,-1}^{\uparrow\downarrow} & -\tilde{\Delta}\varepsilon_\nu & i\tilde{\xi}\varepsilon_{R,\nu}^{\uparrow\downarrow} \\ i\tilde{\xi}^*\varepsilon_{R,1-\nu}^{\downarrow\uparrow} & -\tilde{\Delta}^*\varepsilon_{1-\nu} & i\varepsilon_{R,-1}^{\downarrow\uparrow} & -\varepsilon_{-1} & i\tilde{\xi}\varepsilon_{R,\nu}^{\downarrow\uparrow} & -\tilde{\Delta}\varepsilon_\nu \\ -\tilde{\Delta}\varepsilon_{\nu-1} & i\tilde{\xi}\varepsilon_{R,\nu-1}^{\uparrow\downarrow} & -\tilde{\Delta}^*\varepsilon_{-\nu} & i\tilde{\xi}^*\varepsilon_{R,-\nu}^{\uparrow\downarrow} & -\varepsilon_1 & i\varepsilon_{R,1}^{\uparrow\downarrow} \\ i\tilde{\xi}\varepsilon_{R,\nu-1}^{\downarrow\uparrow} & -\tilde{\Delta}\varepsilon_{\nu-1} & i\tilde{\xi}^*\varepsilon_{R,-\nu}^{\downarrow\uparrow} & -\tilde{\Delta}^*\varepsilon_{-\nu} & i\varepsilon_{R,1}^{\downarrow\uparrow} & -\varepsilon_1 \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

Dado que se conocen todos los elementos de la matriz 6×6 g_ν , en la siguiente sección se procederá a reacomodar dichos elementos de tal manera que permitan expresar (4.11) en su forma condensada y en las bases típicamente utilizadas en la literatura.

4.4. Cambios de base diagonal en espín

El primer paso consta de una transformación unitaria para cambiar la base $c_{\mathbf{k}}$ por la base diagonal de espín $c'_{\mathbf{k}} = (a_{\mathbf{k}}^{\uparrow} a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\uparrow} a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\uparrow} b_{\mathbf{k}}^{\uparrow} b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\uparrow} b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\uparrow} a_{\mathbf{k}}^{\downarrow} a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\downarrow} a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\downarrow} b_{\mathbf{k}}^{\downarrow} b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\downarrow} b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\downarrow})^T$. Posteriormente, se realiza una transformación unitaria para reacomodar los elementos de la base generalizando la metodología seguida por Gamayun et al. [6] al incluir el espín. El resultado es la base $c'_{\mathbf{k}} = (a_{\mathbf{k}}^{\uparrow} b_{\mathbf{k}}^{\uparrow} u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\downarrow} b_{\mathbf{k}}^{\downarrow})^T$ donde el vector columna $u_{\mathbf{k}}$ agrupa los modos dominantes a bajas energías $(a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\uparrow} a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\uparrow} b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\uparrow} b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\uparrow} a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\downarrow} a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\downarrow} b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\downarrow} b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\downarrow})^T$. Es en esta base donde podemos reescribir (4.8a) como (4.12a). El cuadrante central $H_{eff} = H'(3 : 10, 3 : 10)$ es el Hamiltoniano efectivo de 8x8 que se tratará de ahora en adelante de acuerdo con (4.12b)

$$\mathbb{H}' = \sum_{\mathbf{k}} c'_{\mathbf{k}}{}^{\dagger} H' c'_{\mathbf{k}} \quad (4.12a)$$

$$H = \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}{}^{\dagger} H_{eff} u_{\mathbf{k}} \quad (4.12b)$$

Finalmente, se realiza una última transformación unitaria para reordenar la base $u_{\mathbf{k}}$ como $\Psi_{\mathbf{k}} = (-b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\uparrow} a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\uparrow} a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\uparrow} b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\uparrow} - b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\downarrow} a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\downarrow} a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\downarrow} b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\downarrow})^T$. Esta base permite escribir $H_{eff} \rightarrow \mathcal{H}$ como se muestra en (4.13).

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} 0 & (\varepsilon_{-1})^* & \tilde{\Delta}(\varepsilon_{-\nu})^* & 0 & 0 & i(\varepsilon_{R,-1}^{\downarrow\uparrow})^* & i\tilde{\xi}(\varepsilon_{R,-\nu}^{\downarrow\uparrow})^* & 0 \\ \varepsilon_{-1} & 0 & 0 & -\tilde{\Delta}\varepsilon_{\nu} & -i\varepsilon_{R,-1}^{\uparrow\downarrow} & 0 & 0 & i\tilde{\xi}\varepsilon_{R,\nu}^{\uparrow\downarrow} \\ \tilde{\Delta}^*\varepsilon_{-\nu} & 0 & 0 & -\varepsilon_1 & -i\tilde{\xi}^*\varepsilon_{R,-\nu}^{\uparrow\downarrow} & 0 & 0 & i\varepsilon_{R,1}^{\uparrow\downarrow} \\ 0 & -(\tilde{\Delta}\varepsilon_{\nu})^* & -(\varepsilon_1)^* & 0 & 0 & -i(\tilde{\xi}\varepsilon_{R,\nu}^{\downarrow\uparrow})^* & -i(\varepsilon_{R,1}^{\downarrow\uparrow})^* & 0 \\ 0 & i(\varepsilon_{R,1}^{\uparrow\downarrow})^* & i\tilde{\xi}(\varepsilon_{R,-\nu}^{\uparrow\downarrow})^* & 0 & 0 & (\varepsilon_{-1})^* & \tilde{\Delta}(\varepsilon_{-\nu})^* & 0 \\ -i\varepsilon_{R,-1}^{\downarrow\uparrow} & 0 & 0 & i\tilde{\xi}\varepsilon_{R,\nu}^{\downarrow\uparrow} & \varepsilon_{-1} & 0 & 0 & -\tilde{\Delta}\varepsilon_{\nu} \\ -i\tilde{\xi}^*\varepsilon_{R,-\nu}^{\downarrow\uparrow} & 0 & 0 & i\varepsilon_{R,1}^{\downarrow\uparrow} & \tilde{\Delta}^*\varepsilon_{-\nu} & 0 & 0 & -\varepsilon_1 \\ 0 & -i(\tilde{\xi}\varepsilon_{R,\nu}^{\uparrow\downarrow})^* & -i(\varepsilon_{R,1}^{\uparrow\downarrow})^* & 0 & 0 & -(\tilde{\Delta}\varepsilon_{\nu})^* & -(\varepsilon_1)^* & 0 \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

Evidentemente, la forma explícita de (4.13) dependerá del índice ν del patrón

Kekulé en cuestión. Las secciones siguientes se enfocarán en los patrones Kek-Y y Kek-O con índices 1 y 0, respectivamente.

4.5. Hamiltoniano efectivo de grafeno con textura Kekulé y presencia de RSOC

Para encontrar el Hamiltoniano que corresponde al grafeno con distorsiones Kekulé y presencia de RSOC es necesario utilizar (4.14) para determinar los elementos de matriz $\varepsilon_{\pm n}$ y $\varepsilon_{R,\pm n}$, donde $n = 1, 0$. La expansión de $\varepsilon_{\pm 1}$ y ε_0 se muestran en el Apéndice 7.3.

$$\varepsilon_{\pm 1} = \hbar \underbrace{v_0}_{\equiv \frac{3t^{(0)} a_0}{2\hbar}} (\mp k_x + ik_y) \quad (4.14a)$$

$$\varepsilon_0 = 3t^{(0)} \quad (4.14b)$$

$$\varepsilon_{R,\pm 1} = \frac{\lambda_R^{(0)}}{2} \begin{pmatrix} 0 & \frac{3}{2} \mp \frac{3}{2} \\ \frac{3}{2} \pm \frac{3}{2} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.14c)$$

$$\varepsilon_{R,0} = \frac{\lambda_R^{(0)}}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.14d)$$

Por lo tanto, el Hamiltoniano efectivo para grafeno con textura Kekulé y presencia de RSOC tiene la forma de (4.15). Además, se han utilizado las matrices identidad 2x2 de pseudoespín σ_0 y de valle τ_0 junto con la matriz $\tau_{\pm} = \tau_x \pm i\tau_y$

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_0 & \mathcal{H}_R \\ \mathcal{H}_R^\dagger & \mathcal{H}_0 \end{pmatrix} \quad (4.15a)$$

$$\mathcal{H}_0 = \begin{pmatrix} v_0 \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} & \tilde{\Delta} Q_\nu \\ \tilde{\Delta}^* Q_\nu^\dagger & v_0 \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}, \quad Q_\nu = \begin{pmatrix} (\varepsilon_{-\nu})^* & 0 \\ 0 & -\varepsilon_\nu \end{pmatrix} = \begin{cases} 3t^{(0)}\sigma_z & \nu = 0 \\ v_0(\nu p_x - ip_y)\sigma_0 & |\nu| = 1 \end{cases} \quad (4.15b)$$

$$\mathcal{H}_R = \begin{pmatrix} 0 & i(f_{-1}^{\downarrow\uparrow})^* & i\tilde{\Delta}'(f_{-\nu}^{\downarrow\uparrow})^* & 0 \\ -if_{-1}^{\uparrow\downarrow} & 0 & 0 & i\tilde{\Delta}'f_\nu^{\uparrow\downarrow} \\ -i\tilde{\Delta}'^*f_{-\nu}^{\uparrow\downarrow} & 0 & 0 & if_1^{\uparrow\downarrow} \\ 0 & -i(\tilde{\Delta}'f_\nu^{\downarrow\uparrow})^* & -i(f_1^{\downarrow\uparrow})^* & 0 \end{pmatrix} = i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\tau_- & \tilde{\Delta}'Q_1 \\ -(\tilde{\Delta}')^*Q_2 & \frac{1}{2}\tau_+ \end{pmatrix} \quad (4.15c)$$

$$Q_1 = \begin{cases} \tau_0 & \nu = -1 \\ 0_{2 \times 2} & \nu = 0, 1 \end{cases}, \quad Q_2 = \begin{cases} \tau_0 & \nu = 1 \\ 0_{2 \times 2} & \nu = 0, -1 \end{cases} \quad (4.15d)$$

Debe notarse que los elementos incluidos en \mathcal{H}_0 corresponden al Hamiltoniano derivado por Gamayun et al. [6] para grafeno con distorsión Kekulé. Dichos elementos se repiten en la diagonal de \mathcal{H} dada la base diagonal en espín elegida y que éstos corresponden al acoplamiento del pseudoespín con el valle. Mientras tanto, \mathcal{H}_R engloba los elementos que resultan del acoplamiento entre el espín y el valle/pseudoespín. Estos elementos se encuentran fuera de la diagonal de \mathcal{H} como resultado de la elección de base.

4.6. Forma compacta del Hamiltoniano efectivo de grafeno con textura Kekulé y presencia de RSOC

La forma compacta de (4.15) depende del índice ν elegido. A continuación se muestra el Hamiltoniano compacto para la textura Kek-Y (4.16) y para la textura

Kek-O (4.17). Para expresar dichos Hamiltonianos en su forma compacta es necesario recurrir a las matrices identidad 2x2 de espín s_0 , de pseudoespín σ_0 y de valle τ_0 . Asimismo, se requieren los vectores de espín \mathbf{s} , de pseudoespín $\boldsymbol{\sigma}$ y de valle $\boldsymbol{\tau}$. También se definen las amplitudes reales $\tilde{\Delta} = \Delta_0$ y $\tilde{\xi} = \xi_0$. Finalmente, es necesario definir la matriz $\boldsymbol{\sigma}_\tau = \tau_0 \otimes \boldsymbol{\sigma}$ así como los términos de Rashba $\lambda_{R,\sigma} = \frac{3\lambda_R^{(0)}}{2}$ y $\lambda_{R,\tau} = \frac{3\lambda_R^{(0)}\xi_0}{2}$. La forma matricial explícita de cada Hamiltoniano se encuentra en el Apéndice 7.4.

$$\mathcal{H}_{Kek-Y} = s_0 \otimes [v_\sigma \tau_0 \otimes (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) + v_\tau (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\tau}) \otimes \sigma_0] - \frac{\lambda_{R,\tau}}{\hbar} (\mathbf{s} \times \boldsymbol{\tau})_z \otimes \sigma_0 - \frac{\lambda_{R,\sigma}}{\hbar} (\mathbf{s} \times \boldsymbol{\sigma}_\tau)_z \quad (4.16)$$

$$\mathcal{H}_{Kek-O} = s_0 \otimes [v_\sigma \tau_0 \otimes (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) + 3t^{(0)} \Delta_0 \tau_x \otimes \sigma_z] - \frac{\lambda_{R,\sigma}}{\hbar} (\mathbf{s} \times \boldsymbol{\sigma}_\tau)_z \quad (4.17)$$

En ambos casos, los dos primeros términos corresponden a lo derivado anteriormente por Gamayun et al. [6] mientras que los últimos términos corresponden a la incorporación de RSOC en el sistema de grafeno con textura Kekulé. Debido a la elección de la base $\Psi_{\mathbf{k}}$, el término que acopla el espín con el valle en (4.16) presenta la misma forma que los términos de acoplamiento entre espín y pseudoespín de (1.10). Por la misma razón, el último término de (4.16) y (4.17) correspondiente al acoplamiento entre espín y pseudoespín debe ser escrito con ayuda de la matriz $\boldsymbol{\sigma}_\tau$. Sin embargo, conserva la forma mostrada en (1.10) donde el espín se acopla al pseudoespín.

Si bien (4.16) y (4.17) es consistente con la notación utilizada por Gamayun et al. en el contexto de grafeno con textura Kekulé, es posible obtener Hamiltonianos compactos consistentes con la literatura de grafeno con RSOC [7, 3, 37]. Dicho cambio de base se encuentra en el Apéndice 7.5. Es así que obtenemos (4.18) para la textura Kek-Y y (4.19) para la textura Kek-O, donde se ha definido la matriz $\mathbf{S} = \sigma_0 \otimes \mathbf{s}$.

$$\mathcal{H}_{KY} = [v_\sigma \tau_0 \otimes (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) + v_\tau (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\tau}) \otimes \sigma_0] \otimes s_0 + \frac{\lambda_{R,\sigma}}{\hbar} \tau_0 \otimes (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{s})_z + \frac{\lambda_{R,\tau}}{\hbar} (\boldsymbol{\tau} \times \mathbf{S})_z \quad (4.18)$$

$$\mathcal{H}_{KO} = [v_\sigma \tau_0 \otimes (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) + 3t^{(0)} \Delta_0 \tau_x \otimes \sigma_z] \otimes s_0 + \frac{\lambda_{R,\sigma}}{\hbar} (\tau_0 \otimes (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{s})_z) \quad (4.19)$$

A pesar del reordenamiento de los elementos de la forma matricial, la forma com-

pecta de (4.18) y (4.19) es prácticamente idéntica a (4.16) y (4.17), respectivamente. Se preservan los primeros términos de acoplamiento entre momento y pseudoespín/valle. Por un lado, los términos de acoplamiento entre espín y pseudoespín se encuentran escritos en acuerdo con (1.10) mientras que los términos de acoplamiento entre espín y valle deben ser escritos por medio de la matriz \mathbf{S} . La forma explícita de los Hamiltonianos (4.18) y (4.19) se muestra en el Apéndice 7.5.

La derivación analítica de los Hamiltonianos a bajas energías (4.16) y (4.17) para el sistema de grafeno con acoplamiento espín-órbita de Rashba y textura Kek-Y y Kek-O, respectivamente, conforma uno de los resultados más importantes de la presente tesis. En el capítulo siguiente se utilizan las eigenenergías y eigenvectores de los Hamiltonianos para calcular las dispersiones energéticas y las orientaciones de los grados de libertad de los portadores de carga del sistema.

Además, los Hamiltonianos efectivos aquí derivados serán de gran utilidad para la exploración de los niveles de Landau y propiedades de magnetotransporte en estos sistemas. Por ejemplo, ver la tesis de licenciatura de Santiago Galván y García [38].

Capítulo 5

Dispersiones de grafeno con Kekulé y RSOC

5.1. Eigenenergías del sistema

Las 8 eigenenergías derivadas de (4.16) para el sistema de grafeno con textura Kek-Y y RSOC se muestran en (5.1) como funciones de $k = |\mathbf{k}|$. Además, se definen las velocidades $v_\sigma = v_F$ y $v_\tau = v_F \Delta_\sigma$. El uso de los índices $\sigma, s, \tau = \pm$ y $\zeta = \tau s$ será discutido en breve.

$$E_{Kek-Y}(\mathbf{k}) = \sigma \left[\sqrt{\left(\hbar v_\tau k + \zeta \frac{\lambda_{R,\sigma}}{2} \right)^2 + \left(\frac{\lambda_{R,\tau}}{2} \right)^2} + s \sqrt{\left(\hbar v_\sigma k + \zeta \frac{\lambda_{R,\tau}}{2} \right)^2 + \left(\frac{\lambda_{R,\sigma}}{2} \right)^2} \right] \quad (5.1)$$

Las 8 eigenenergías son resultado de la combinación de los tres índices σ, τ y s . El primer índice σ denota electrón (+) y hueco (-) al igual que (2.3). El segundo índice τ denota valle (+) y (-), para lo que hay que remitirse nuevamente a (2.3). Cuando el sistema carece de acoplamiento espín-órbita, se producen dos conos para electrones (y dos para huecos) con pendientes $\hbar(1 \pm \Delta_0)v_0$. Por lo tanto, podemos asignar el índice $\tau = +$ al cono con pendiente $\hbar(1 + \Delta_0)v_0$ y el índice $\tau = -$ al cono con pendiente $\hbar(1 - \Delta_0)v_0$. Análogamente en el sistema de grafeno con textura Kek-Y y RSOC, entre dos eigenenergías que comparten el punto $k = 0$ se asigna el índice $\tau = +$ y $\tau = -$ a la banda con mayor y menor concavidad, respectivamente. El tercer índice s denota

espín (+) y (-), para lo que hay que remitirse a (1.11). En ausencia de distorsiones Kekulé, el RSOC eleva en energía el estado con índice $s=+$ con respecto al estado con índice $s = -$. Análogamente en el sistema de grafeno con textura Kek-Y y RSOC, asigna el índice $s = +$ a las bandas que se elevan en energía con respecto a las que llevan el índice $s = -$.

En la Figura 5.1 se grafican las eigenenergías mostradas anteriormente en (5.1) para $k_y = 0$ y $k = |\mathbf{k}| = k_x$. Además de un código de colores para diferenciar las eigenenergías, se muestra una tabla con los índices correspondientes a cada una de ellas. Para graficar las eigenenergías se utilizaron valores de $t^{(0)} = 2.4 \text{ eV}$, $\lambda_R^{(0)} = 100 \text{ meV}$, $\Delta_0 = 0.1$ y $\xi_0 = 0.1$ manteniendo la normalización de la distancia carbono-carbono $a_0 = 1$.

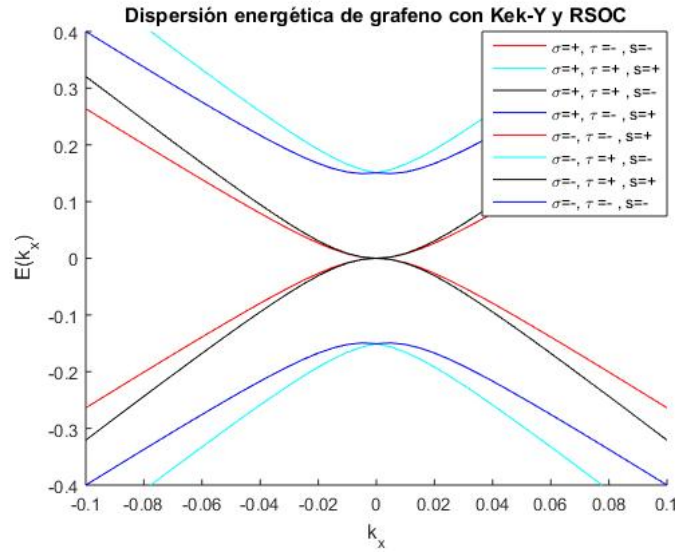


Figura 5.1: Dispersión electrónica de grafeno con Kek-Y y RSOC para $k_y = 0$ y $k = |\mathbf{k}| = k_x$. Un código de colores etiqueta cada eigenenergía mientras que los índices σ , τ , y s diferencian entre electrón/hueco, valle +/- y espín +/-, respectivamente.

La dispersión mostrada en la Figura 5.1 manifiesta características heredadas tanto de la textura Kek-Y y como de la RSOC; los estados con índice de espín contrario se separan en energía mientras que los estados con índice de valle contrario muestran una concavidad diferente una con respecto al otro. Al evaluar las eigenenergías en

$k_x = 0$, la separación E_g entre estados con índice de espín contrario esta dada por (5.2), con un valor de 150 meV para este cálculo particular.

$$E_g = \sqrt{\lambda_{R,\sigma}^2 + \lambda_{R,\tau}^2} \quad (5.2)$$

Las 4 eigenenergías derivadas de (4.17) para el sistema de grafeno con textura Kek-O y RSOC se muestran en (5.3) como funciones de $k = |\mathbf{k}|$. El uso de los índices $\tau, s = \pm$ sigue la misma lógica que para la textura Kek-Y.

$$E_{Kek-O}(\mathbf{k}) = \sigma \sqrt{(\hbar v_{\sigma k})^2 + \frac{(\lambda_{R,\sigma})^2}{8} + (3t^{(0)}\Delta_0)^2} + s \sqrt{(\hbar\lambda_{R,\sigma}v_{\sigma}k)^2 + \frac{(\lambda_{R,\sigma})^4}{4}} \quad (5.3)$$

En contraste con (5.1), (5.3) solo presenta los índices σ y s . Dado que para electrones (huecos) con índice $\sigma = +$ ($\sigma = -$) hay dos eigenenergías que difieren por un factor dependiente del término de Rashba $\lambda_R^{(0)}$, se utiliza el índice de espín $s = \pm$. Al no contar con el índice $\tau = \pm$, la energía del estado de valle (+) se encuentra degenerada con la energía del estado de valle (-).

En la Figura 5.2 se grafican las eigenenergías mostradas anteriormente en (5.3) para $k_y = 0$ y $k = |\mathbf{k}| = k_x$. Además de un código de colores para diferenciar las eigenenergías, se muestra una tabla con los índices correspondientes a cada una de ellas. Para graficar las eigenenergías se utilizaron valores de $t^{(0)} = 2.4 \text{ eV}$, $\lambda_R^{(0)} = 100 \text{ meV}$, $\Delta_0 = 0.1$ y $\xi_0 = 0.1$ manteniendo la normalización de la distancia carbono-carbono $a_0 = 1$.

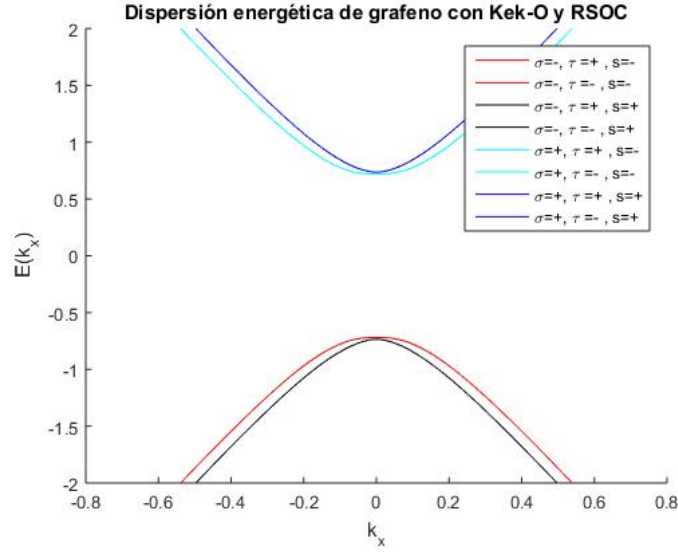


Figura 5.2: Dispersión electrónica de grafeno con Kek-O y RSOC para $k_y = 0$ y $k = |\mathbf{k}| = kx$. Un código de colores etiqueta cada eigenenergía mientras que los índices σ , τ , y s diferencian entre electrón/hueco, valle (+)/(-) y espín (+)/(-), respectivamente.

La dispersión mostrada en la Figura 5.2 también muestra características heredadas de la textura Kek-O y del RSOC; los estados con índice de espín contrario se separan en energía mientras que los estados con índice de valle contrario se encuentran degenerados. La gráfica asemeja a la Figura 2.4 que describe la dispersión de grafeno con textura Kek-O donde se observan solo dos bandas aunado a una brecha entre éstas. Además, debido a la presencia de RSOC existe un desdoblamiento de las bandas en la Figura 5.2 que asemeja lo visto en la Figura 1.5 para estados con índice de espín contrario.

Por un lado, la separación en $k_x = 0$ entre bandas con índice de espín contrario esta dada por (5.4a) con un valor de 0.016 eV para este cálculo particular. Por otro lado, la brecha entre electrón y hueco en el mismo punto esta dada por (5.4b) con un

valor de 1.44 eV para este cálculo particular.

$$E_{g,1} = \sqrt{(\lambda_{R,\sigma})^2 + (3t^{(0)}\Delta_0)^2} \quad (5.4a)$$

$$E_{g,2} = 2(3t^{(0)}\Delta_0) \quad (5.4b)$$

Cabe destacar que ambas separaciones son modulables con respecto a la amplitud Δ_0 proveniente de la textura Kekulé y el parámetro de Rashba $\lambda_R^{(0)}$ dependiente del sustrato o campo eléctrico externo utilizado.

Como se vio anteriormente, a cada eigenenergía le corresponde un determinado índice de espín, valle y pseudoespín. Sin embargo, la orientación de dichos grados de libertad puede variar con respecto a la dirección del momento. En la sección siguiente se calculará la orientación de dichos grados de libertad por medio de los eigenvectores de los Hamiltonianos (4.16) y (4.17).

Capítulo 6

Orientación de espín, pseudoespín y valle

6.1. Cálculo numérico de la orientación de espín, pseudoespín e valle

En el capítulo anterior se utilizaron las eigenenergías de los Hamiltonianos efectivos (4.16) y (4.17) para calcular las dispersiones energéticas del sistema. Ahora será necesario utilizar los eigenvectores $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$ de dichos Hamiltonianos para calcular el valor esperado $\langle \psi_{\mathbf{k}} | \boldsymbol{\kappa} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle$, donde $\boldsymbol{\kappa} = \boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{s}$. Estos valores esperados corresponden con la orientación de los grados de libertad de los portadores de carga en el sistema de grafeno con distorsiones Kekulé y RSOC.

Explícitamente, la orientación del espín, pseudoespín y valle se calcula para cada uno de los eigenvectores (uno por cada eigenenergía) como se muestra a continuación.

$$\langle \mathbf{s} \rangle = \langle \mathbf{s} \otimes \tau_0 \otimes \sigma_0 \rangle$$

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \langle s_0 \otimes \tau_0 \otimes \boldsymbol{\sigma} \rangle$$

$$\langle \boldsymbol{\tau} \rangle = \langle s_0 \otimes \boldsymbol{\tau} \otimes \sigma_0 \rangle$$

El orden de uso de las matrices identidad 2x2 de espín s_0 , valle τ_0 y pseudoespín σ_0 depende enteramente de la base elegida. En este caso corresponden a la base diagonal en espín $\Psi_{\mathbf{k}} = (-b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\dagger a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^\dagger b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^\dagger - b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\dagger a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^\dagger b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^\dagger)^T$. Cuando se haga referencia a las componentes en el plano de las orientaciones debe entenderse las componentes en el plano de movimiento de los portadores de carga en el sistema, por convención el plano x-y. Asimismo, las orientaciones fuera del plano hacen referencia a la dirección perpendicular al plano de movimiento de los portadores de carga; por convención el eje z.

En la Figura 6.1 se muestran las orientaciones de a) espín $\langle \mathbf{s} \rangle$, b) pseudoespín $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$ y c) valle $\langle \boldsymbol{\tau} \rangle$ a una energía $E > 0$ para el sistema de grafeno con patrón Kek-Y y RSOC. Las gráficas muestran un plano paralelo al plano $k_x - k_y$ a la altura de la energía dada. El código de colores utilizado concuerda con el código utilizado en la Figura 5.1.

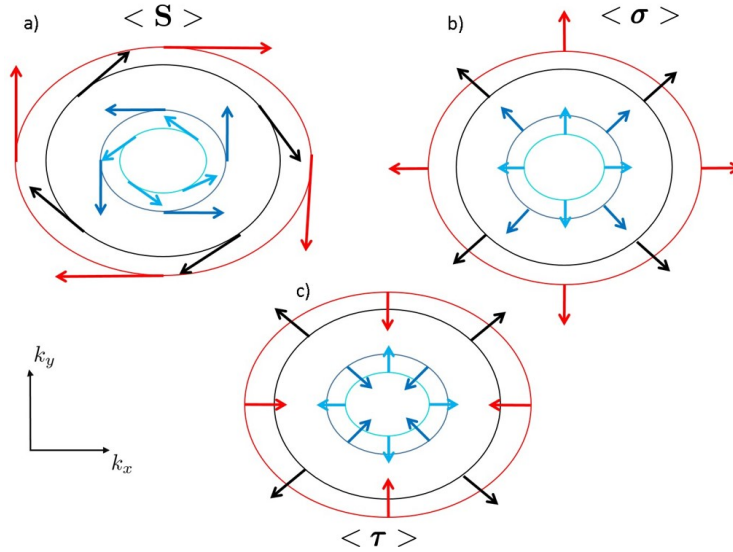


Figura 6.1: Orientaciones de a) espín $\langle \mathbf{s} \rangle$, b) pseudoespín $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$

Como se observa en la Figura 6.1a, la dirección del espín siempre es perpendicular a la dirección del momento $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. Además, las superficies muestran dos rotaciones de la orientación de espín; a favor y en contra de las manecillas del reloj. Si uno se remite a la Figura 5.1, la dirección de rotación es determinada por el índice de espín distinto entre las bandas rojas y negras y las bandas azul y cian, (-) y (+) respectivamente. Por

un lado, en la 6.1b se observa que la dirección del pseudoespín es siempre paralela a la dirección del momento. Por otro lado, 6.1c muestra que la dirección del valle puede ser paralela o antiparalela a la dirección del momento. Nuevamente hay que remitirse a la Figura 5.1 para recordar que las dispersiones roja y azul pertenecen a un índice de valle distinto a las de color negra y cian, (-) y (+) respectivamente.

En la Figura 6.1 se muestran las orientaciones de a) espín $\langle \mathbf{s} \rangle$, b) pseudoespín $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$ y c) valle $\langle \boldsymbol{\tau} \rangle$ a una energía $E > 0$ para el sistema de grafeno con patrón Kek-O y RSOC. Las gráficas muestran un plano paralelo al plano $k_x - k_y$ a la altura de la energía dada. El código de colores concuerda con el código utilizado en la Figura 5.2.

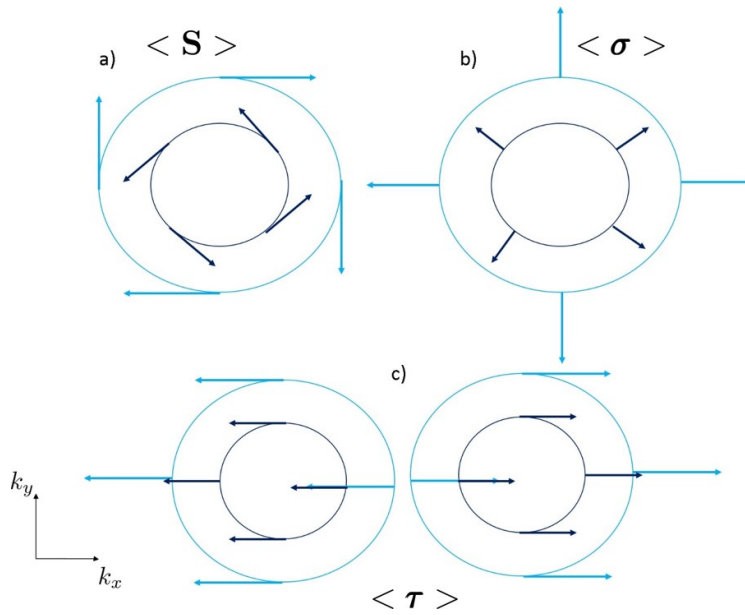


Figura 6.2: Orientaciones de a) espín $\langle \mathbf{s} \rangle$, b) pseudoespín $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$

Al igual que lo visto en la Figura 6.1, la orientación de espín (Figura 6.2a) es perpendicular al momento $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ mientras que el pseudoespín (Figura 6.2b) es paralelo al momento. Sin embargo, la orientación de valle (Figura 6.2c) presenta un comportamiento inusual. Para ambos eigenvectores asociados a las energías degeneradas, la orientación de valle apunta de manera preferencial en la dirección x . Como se observa en la Figura 6.2c, la dirección en la que apunta el valle es contraria

entre estados degenerados en energía. Este comportamiento inusual será discutido más adelante.

Todos los grados de libertad de la textura Kek-O presentan componentes fuera del plano. En el caso del espín, estas componentes son 2 órdenes de magnitud menores a las del plano. Sin embargo, en el caso del valle y el pseudoespín las componentes fuera del plano son del mismo orden de magnitud que las componentes del plano.

En aras de obtener una explicación del origen de las componentes fuera del plano de las orientaciones asociadas a los grados de libertad así como del comportamiento inusual de la orientación de valle en la textura Kek-O, fue necesario visitar nuevamente el trabajo de Gamayun et al. [6]. Tras obtener de manera numérica los eigenvectores asociados al Hamiltoniano derivado por Gamayun et al. para grafeno con distorsiones Kekulé, se calcularon las orientaciones de pseudoespín y valle tanto para la textura Kek-Y como para la textura Kek-O. Mientras que los grados de libertad en la textura Kek-Y no presentaron componentes fuera del plano, la textura Kek-O volvió a mostrar el mismo comportamiento inusual. Por un lado, la orientación de valle presentó una dirección preferencial en x . Por otro lado, las orientaciones tanto de valle como de pseudoespín presentaron componentes fuera del plano del mismo orden de magnitud que aquellas del plano. A manera de trabajo futuro, la ruta a seguir es la obtención de los eigenvectores y orientaciones de manera analítica.

Analizando con más cuidado el Hamiltoniano para la textura Kek-O (4.17) se puede mostrar que este no satisface la simetría de inversión temporal, es decir, no satisface (6.1)

$$(s_x \otimes \sigma_x \otimes \tau_x) \mathcal{H}_{Kek-O}^* (s_x \otimes \sigma_x \otimes \tau_x) = H_{Kek-O} \quad (6.1)$$

El hecho de no satisfacer (6.1) conduce al rompimiento de la simetría temporal de las orientaciones de valle para el sistema de grafeno con textura Kek-O. Sin embargo, la simetría quiral se conserva.

Capítulo 7

Conclusiones

Se derivó un Hamiltoniano efectivo en el marco del modelo de amarre fuerte para un sistema de grafeno con distorsión Kekulé y acoplamiento espín-órbita de Rashba. El Hamiltoniano efectivo derivado presenta en su forma compacta elementos que acoplan al momento y al espín con los dos grados de libertad de los portadores de carga en grafeno; pseudoespín σ y valle τ . Este Hamiltoniano puede ser escrito en diferentes bases para coincidir, ya sea con la literatura sobre grafeno con Kekulé o sobre grafeno con acoplamiento espín-órbita de Rashba.

Las dispersiones electrónicas derivadas del Hamiltoniano efectivo muestran características heredadas tanto del acoplamiento espín-órbita de Rashba como de la textura Kekulé. Por un lado, la textura Kek-Y presenta separación en energía de las bandas de conducción (y de valencia) debido al índice de espín. Además, la separación en energía es dependiente del parámetro de Rashba modificado por la deformación de la red de grafeno. Estados con el mismo índice de espín se desdoblán en dos bandas con diferente concavidad debido al índice de valle. Por otro lado, la textura Kek-O presentan degeneración en el índice de valle junto a una brecha entre bandas de conducción y valencia dependiente de la energía de *hopping* modificada por la textura Kekulé. Asimismo, existe un desdoblamiento debido al índice de espín con una separación dependiente del parámetro de Rashba y la energía de *hopping* modificada por la textura Kekulé. La naturaleza modulable de este nuevo comportamiento electrónico resulta atractivo para la exploración tanto teórica como experimental de sistemas similares.

Las orientaciones de espín $\langle \mathbf{s} \rangle$, valle $\langle \boldsymbol{\tau} \rangle$ y pseudoespín $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$ calculadas numéricamente muestran características novedosas en el caso de la textura Kek-O; componentes fuera del plano de movimiento y orientación preferencial del valle. Este comportamiento inusual es consecuencia del rompimiento de inversión de simetría temporal para el Hamiltoniano correspondiente a la textura Kek-O.

Los cálculos y expresiones aquí reportadas para los Hamiltonianos efectivos, y las dispersiones electrónicas de grafeno con acoplamiento espín-órbita de Rashba y distorsión Kekulé serán de gran utilidad para el cálculo analítico de los espectros con campo magnético (niveles de Landau) así como de las propiedades de magnetotransporte.

Bibliografía

- [1] A. C. Neto, F. Guinea, N. M. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, “The electronic properties of graphene,” *Reviews of modern physics*, vol. 81, no. 1, p. 109, 2009.
- [2] C. Chamon, “Solitons in carbon nanotubes,” *Phys. Rev. B*, vol. 62, pp. 2806–2812, 2000.
- [3] D. Bercioux and P. Lucignano, “Quantum transport in Rashba spin–orbit materials: a review,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 78, no. 10, p. 106001, 2015.
- [4] C. Gutierrez, C.-J. Kim, L. Brown, T. Schiros, D. Nordlund, E. B. Lochocki, K. M. Shen, J. Park, and A. N. Pasupathy, “Imaging chiral symmetry breaking from kekulé bond order in graphene,” *Nature Physics*, vol. 12, pp. 950–958, 2016.
- [5] C. Gutierrez, *Visualizing Ordered Electronic States in Epitaxial Graphene*. PhD thesis, Columbia University, 2015.
- [6] 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*, vol. 20, no. 2, p. 023016, 2018.
- [7] B. Berche, F. Mireles, and E. Medina, “Rashba spin-orbit interaction enhanced by graphene in-plane deformations,” *Condens. Matter Phys*, vol. 20, no. 1, 2017.

- [8] M. J. Allen, V. C. Tung, and R. B. Kaner, “Honeycomb carbon: a review of graphene,” *Chemical reviews*, vol. 110, no. 1, pp. 132–145, 2009.
- [9] 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*, vol. 306, no. 5696, pp. 666–669, 2004.
- [10] C. N. R. Rao, A. K. Sood, K. S. Subrahmanyam, and A. Govindaraj, “Graphene: the new two-dimensional nanomaterial,” *Angewandte Chemie International Edition*, vol. 48, no. 42, pp. 7752–7777, 2009.
- [11] A. K. Geim and K. S. Novoselov, “The rise of graphene,” in *Nanoscience and Technology: A Collection of Reviews from Nature Journals*, pp. 11–19, World Scientific, 2010.
- [12] A. K. Geim, “Graphene: status and prospects,” *science*, vol. 324, no. 5934, pp. 1530–1534, 2009.
- [13] V. B. Mohan, K.-t. Lau, D. Hui, and D. Bhattacharyya, “Graphene-based materials and their composites: a review on production, applications and product limitations,” *Composites Part B: Engineering*, vol. 142, pp. 200–220, 2018.
- [14] A. K. Sood, I. Lund, Y. R. Puri, H. Efstathiadis, P. Haldar, N. K. Dhar, J. Lewis, M. Dubey, E. Zakar, P. Wijewarnasuriya, *et al.*, “Review of graphene technology and its applications for electronic devices,” in *Graphene-New Trends and Developments*, IntechOpen, 2015.
- [15] A. López, L. Colmenárez, M. Peralta, F. Mireles, and E. Medina, “Proximity-induced spin-orbit effects in graphene on au,” *Physical Review B*, vol. 99, no. 8, p. 085411, 2019.
- [16] H. Haugen, D. Huertas-Hernando, and A. Brataas, “Spin transport in proximity-induced ferromagnetic graphene,” *Physical Review B*, vol. 77, no. 11, p. 115406, 2008.

- [17] W. Han, R. K. Kawakami, M. Gmitra, and J. Fabian, “Graphene spintronics,” *Nature nanotechnology*, vol. 9, no. 10, p. 794, 2014.
- [18] M. Peralta, E. Medina, and F. Mireles, “Proximity-induced exchange and spin-orbit effects in graphene on Ni and Co,” *Phys. Rev. B*, vol. 99, p. 195452, May 2019.
- [19] D. Marchenko, A. Varykhalov, M. Scholz, G. Bihlmayer, E. Rashba, A. Rybkin, A. Shikin, and O. Rader, “Giant Rashba splitting in graphene due to hybridization with gold,” *Nature Communications*, vol. 3, p. 1232, November 2012.
- [20] A. Varykhalov, J. Sánchez-Barriga, A. M. Shikin, C. Biswas, E. Vescovo, A. Rybkin, D. Marchenko, and O. Rader, “Electronic and magnetic properties of quasi-freestanding graphene on ni,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101, p. 157601, Oct 2008.
- [21] Y. S. Dedkov, M. Fonin, U. Rüdiger, and C. Laubschat, “Rashba effect in the graphene/ni(111) system,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 100, p. 107602, Mar 2008.
- [22] O. Rader, A. Varykhalov, J. Sánchez-Barriga, D. Marchenko, A. Rybkin, and A. M. Shikin, “Is there a Rashba effect in graphene on 3d ferromagnets?,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 102, p. 057602, Feb 2009.
- [23] Z. Lin, W. Qin, J. Zeng, W. Chen, P. Cui, J.-H. Cho, Z. Qiao, and Z. Zhang, “Competing gap opening mechanisms of monolayer graphene and graphene nanoribbons on strong topological insulators,” *Nano letters*, vol. 17, no. 7, pp. 4013–4018, 2017.
- [24] D. A. Ruiz-Tijerina, E. Andrade, R. Carrillo-Bastos, F. Mireles, and G. G. Naumis, “Multiflavor dirac fermions in kekulé-distorted graphene bilayers,” *Phys. Rev. B*, vol. 100, p. 075431, Aug 2019.
- [25] C. Mudry, “Two-dimensional materials: Heavy going,” *Nature Physics*, vol. 12, no. 10, p. 895, 2016.

- [26] S. Konschuh, M. Gmitra, and J. Fabian, “Tight-binding theory of the spin-orbit coupling in graphene,” *Physical Review B*, vol. 82, no. 24, p. 245412, 2010.
- [27] C.-Y. Hou, C. Chamon, and C. Mudry, “Electron fractionalization in two-dimensional graphenelike structures,” *Physical review letters*, vol. 98, no. 18, p. 186809, 2007.
- [28] A. Manchon, H. C. Koo, J. Nitta, S. Frolov, and R. Duine, “New perspectives for Rashba spin–orbit coupling,” *Nature materials*, vol. 14, no. 9, p. 871, 2015.
- [29] P. Y. Yu and C. M., *Fundamentals of semiconductors*. 2010.
- [30] J. Davies, *The Physics of Low-Dimensional Semiconductor*. 1998.
- [31] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, “Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers,” *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 17, pp. 6039–6045, nov 1984.
- [32] G. Bihlmayer, O. Rader, and R. Winkler, “Focus on the Rashba effect,” *New Journal of Physics*, vol. 17, no. 5, p. 050202, 2015.
- [33] C. L. Kane and E. J. Mele, “Quantum spin Hall effect in graphene,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, p. 226801, 2005.
- [34] E. I. Rashba, “Graphene with structure-induced spin-orbit coupling: Spin-polarized states, spin zero modes, and quantum Hall effect,” *Phys. Rev. B*, vol. 79, p. 161409, Apr 2009.
- [35] F. Kuemmeth and E. I. Rashba, “Giant spin rotation under quasiparticle-photoelectron conversion: Joint effect of sublattice interference and spin-orbit coupling,” *Phys. Rev. B*, vol. 80, p. 241409, Dec 2009.
- [36] H. Min, J. E. Hill, N. A. Sinitsyn, B. R. Sahu, L. Kleinman, and A. H. MacDonald, “Intrinsic and Rashba spin-orbit interactions in graphene sheets,” *Phys. Rev. B*, vol. 74, p. 165310, 2006.

- [37] D. Pesin and A. H. MacDonald, “Spintronics and pseudospintronics in graphene and topological insulators,” *Nature Materials*, vol. 11, 2012.
- [38] S. Galván, “Niveles de Landau en grafeno con deformaciones de Kekulé y espín-órbita inducidos,” 2019.

Apéndice

7.1. Identidades de $\varepsilon(\mathbf{k})$

Con el fin de encontrar escribir el Hamiltoniano (4.6) y su evaluación en $\mathbf{k} \pm \mathbf{G}$ en términos del índice ν , es necesario considerar las identidades (4.7). A continuación se demuestran dichas identidades.

Prueba de la primera identidad:

$$\begin{aligned}\varepsilon(\mathbf{k} + 3c\mathbf{K}_{\pm}) &= t^{(0)}(e^{i(\mathbf{k}+3c\mathbf{K}_{\pm})\cdot\boldsymbol{\delta}_1} + e^{i(\mathbf{k}+3c\mathbf{K}_{\pm})\cdot\boldsymbol{\delta}_2} + e^{i(\mathbf{k}+3c\mathbf{K}_{\pm})\cdot\boldsymbol{\delta}_3}) \\ &= t^{(0)}(e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_1} e^{ic\pi(\pm 1-1)} + e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_2} e^{-ic\pi(\pm 1+1)} + e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_3} e^{ic2\pi}) = \varepsilon(\mathbf{k})\end{aligned}$$

Prueba de la segunda identidad:

$$\begin{aligned}e^{ic\frac{2\pi}{3}}\varepsilon(\mathbf{k} + c(\mathbf{K}_+ + \mathbf{K}_-)) &= \\ t^{(0)}e^{ic\frac{2\pi}{3}}(e^{i(\mathbf{k}+c(\mathbf{K}_++\mathbf{K}_-))\cdot\boldsymbol{\delta}_1} + e^{i(\mathbf{k}+c(\mathbf{K}_++\mathbf{K}_-))\cdot\boldsymbol{\delta}_2} + e^{i(\mathbf{k}+c(\mathbf{K}_++\mathbf{K}_-))\cdot\boldsymbol{\delta}_3}) \\ &= t^{(0)}e^{ic\frac{2\pi}{3}}(e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_1} e^{-ic\frac{2\pi}{3}} + e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_2} e^{-ic\frac{2\pi}{3}} + e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_3} e^{ic\frac{4\pi}{3}}) = \varepsilon(\mathbf{k})\end{aligned}$$

7.2. Evaluación del Hamiltoniano en $\mathbf{k} \pm \mathbf{G}$

Con el fin de expandir la base de trabajo, se evalúa (4.6) en $\mathbf{k} \pm \mathbf{G}$. En el caso $\mathbf{k} + \mathbf{G}$ obtiene lo siguiente.

$$\begin{aligned}H_0(\mathbf{k} + \mathbf{G}) &= \sum_{\mathbf{k} < \boldsymbol{\eta}} -[\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{G})a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\eta\dagger} b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\eta} + \Delta\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{G} + p\mathbf{K}_+ + q\mathbf{K}_-)a_{\mathbf{k}+2\mathbf{G}}^{\eta\dagger} b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\eta} + \\ &\quad \Delta^*\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{G} - p\mathbf{K}_+ - q\mathbf{K}_-)a_{\mathbf{k}}^{\eta\dagger} b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\eta} + H.c]\end{aligned}$$

$$H_R(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = \sum_{\mathbf{k} < \eta \neq \mu} i[\varepsilon_R^{\eta, \mu}(\mathbf{k} + \mathbf{G})a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\eta \dagger} b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^\mu + \xi \varepsilon_R^{\eta, \mu}(\mathbf{k} + \mathbf{G} + p\mathbf{K}_+ + q\mathbf{K}_-)a_{\mathbf{k}+2\mathbf{G}}^{\eta \dagger} b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^\mu + \xi^* \varepsilon_R^{\eta, \mu}(\mathbf{k} + \mathbf{G} - p\mathbf{K}_+ - q\mathbf{K}_-)a_{\mathbf{k}}^{\eta \dagger} b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^\mu - H.c]$$

Para restringir el análisis a la zona de Brillouin reducida, los términos $a_{\mathbf{k}+2\mathbf{G}}^\dagger$ necesita ser multiplicado por un 1 conveniente con la forma de $e^{\pm i3\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} = e^{\pm i3\frac{2\pi}{3}(m-n)} = e^{\pm i2\pi(m-n)}$ de manera que obtenemos $e^{-i3\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{k}+2\mathbf{G}}^\dagger = a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\dagger$. Por lo tanto, al utilizar las identidades anteriores es posible expresar (4.6) evaluado en $\mathbf{k} + \mathbf{G}$ en términos del índice ν . Además, se define $\tilde{\Delta} = \Delta e^{i\frac{2\pi}{3}(p+q)}$ y $\tilde{\xi} = \xi e^{i\frac{2\pi}{3}(p+q)}$.

$$\begin{aligned} H_0(\mathbf{k} + \mathbf{G}) &= \\ \sum_{\mathbf{k} < \eta} & -[\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{G})a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\eta \dagger} b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^\eta + \tilde{\Delta} \varepsilon(\mathbf{k} + \underbrace{(1+q-p)\mathbf{K}_+ + (p-1-q)\mathbf{K}_-}_{\nu\mathbf{G}})a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\eta \dagger} b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^\eta + \\ & \tilde{\Delta}^* \varepsilon(\mathbf{k} + \underbrace{(p-q-2)\mathbf{K}_+ + (q-p+2)\mathbf{K}_-}_{(-\nu-1)\mathbf{G}})a_{\mathbf{k}}^{\eta \dagger} b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^\eta + H.c] \\ H_R(\mathbf{k} + \mathbf{G}) &= \sum_{\mathbf{k} < \eta \neq \mu} i[\varepsilon_R^{\eta, \mu}(\mathbf{k} + \mathbf{G})a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\eta \dagger} b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^\mu + \tilde{\xi} \varepsilon_R^{\eta, \mu}(\mathbf{k} + \\ & \underbrace{(1+q-p)\mathbf{K}_+ + (p-1-q)\mathbf{K}_-}_{\nu\mathbf{G}})a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\eta \dagger} b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^\mu + \tilde{\xi}^* \varepsilon_R^{\eta, \mu}(\mathbf{k} + \\ & \underbrace{(p-q-2)\mathbf{K}_+ + (q-p+2)\mathbf{K}_-}_{(-\nu-1)\mathbf{G}})a_{\mathbf{k}}^{\eta \dagger} b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^\mu - H.c] \end{aligned}$$

A continuación se muestra el resultado de la evaluación en $\mathbf{k} - \mathbf{G}$.

$$\begin{aligned} H_0(\mathbf{k} - \mathbf{G}) &= \sum_{\mathbf{k} < \eta} -[\varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{G})a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\eta \dagger} b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\eta + \Delta \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{G} + p\mathbf{K}_+ + q\mathbf{K}_-)a_{\mathbf{k}}^{\eta \dagger} b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\eta + \\ & \Delta^* \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{G} - p\mathbf{K}_+ - q\mathbf{K}_-)a_{\mathbf{k}-2\mathbf{G}}^{\eta \dagger} b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\eta + H.c] \\ H_R(\mathbf{k} - \mathbf{G}) &= \sum_{\mathbf{k} < \eta \neq \mu} i[\varepsilon_R^{\eta, \mu}(\mathbf{k} - \mathbf{G})a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\eta \dagger} b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\mu + \xi \varepsilon_R^{\eta, \mu}(\mathbf{k} - \mathbf{G} + p\mathbf{K}_+ + \\ & q\mathbf{K}_-)a_{\mathbf{k}}^{\eta \dagger} b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\mu + \xi^* \varepsilon_R^{\eta, \mu}(\mathbf{k} - \mathbf{G} - p\mathbf{K}_+ - q\mathbf{K}_-)a_{\mathbf{k}-2\mathbf{G}}^{\eta \dagger} b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\mu - H.c] \end{aligned}$$

Posteriormente, se utiliza el 1 conveniente $e^{i3\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$ de tal forma que obtenemos $e^{i3\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{k}-2\mathbf{G}}^\dagger = a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^\dagger$. En términos del índice ν se puede reescribir el resultado anterior como se muestra a continuación.

$$\begin{aligned}
 H_0(\mathbf{k} - \mathbf{G}) &= \\
 \sum_{\mathbf{k} < \eta} & -[\varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{G})a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\eta\dagger}b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\eta + \tilde{\Delta}\varepsilon(\mathbf{k} + \underbrace{(2+q-p)\mathbf{K}_+ + (p-q-2)\mathbf{K}_-}_{(\nu+1)\mathbf{G}})a_{\mathbf{k}}^{\eta\dagger}b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\eta + \\
 & \tilde{\Delta}^*\varepsilon(\mathbf{k} + \underbrace{(p-q-1)\mathbf{K}_+ + (1+q-p)\mathbf{K}_-}_{-\nu\mathbf{G}})a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\eta\dagger}b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\eta + H.c.] \\
 H_R(\mathbf{k} - \mathbf{G}) &= \\
 \sum_{\mathbf{k} < \eta \neq \mu} & i[\varepsilon_R^{\eta,\mu}(\mathbf{k}-\mathbf{G})a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^{\eta\dagger}b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\mu + \tilde{\xi}\varepsilon_R^{\eta,\mu}(\mathbf{k} + \underbrace{(2+q-p)\mathbf{K}_+ + (p-q-2)\mathbf{K}_-}_{(\nu+1)\mathbf{G}})a_{\mathbf{k}}^{\eta\dagger}b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\mu + \\
 & \tilde{\xi}^*\varepsilon_R^{\eta,\mu}(\mathbf{k} + \underbrace{(p-q-1)\mathbf{K}_+ + (1+q-p)\mathbf{K}_-}_{-\nu\mathbf{G}})a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{\eta\dagger}b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\mu - H.c.]
 \end{aligned}$$

7.3. Expansiones a primer orden de $\varepsilon_{\pm 1}$ y ε_0

Con el fin de encontrar la forma explícita del Hamiltoniano (4.13), es necesario determinar la forma explícita de $\varepsilon_{\pm 1}$ y ε_0 .

Por un lado, la expansión a primer orden de $\varepsilon_{\pm 1}$ se muestra a continuación.

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{\pm 1} &= t^{(0)}(e^{i(\mathbf{k}\pm\mathbf{G})\cdot\mathbf{s}_1} + e^{i(\mathbf{k}\pm\mathbf{G})\cdot\mathbf{s}_1} + e^{i(\mathbf{k}\pm\mathbf{G})\cdot\mathbf{s}_1}) = \\
 & t^{(0)}((1 + i\frac{\sqrt{3}}{2}k_x - i\frac{1}{2}k_y)e^{\pm i\frac{2\pi}{3}} + (1 - i\frac{\sqrt{3}}{2}k_x - i\frac{1}{2}k_y)e^{\mp i\frac{2\pi}{3}} + (1 + ik_y)) \\
 & = t^{(0)}((1 + i\frac{\sqrt{3}}{2}k_x - i\frac{1}{2}k_y)(-\frac{1}{2} \pm i\frac{\sqrt{3}}{2}) + (1 - i\frac{\sqrt{3}}{2}k_x - i\frac{1}{2}k_y)(-\frac{1}{2} \mp i\frac{\sqrt{3}}{2}) + (1 + ik_y)) \\
 & = t^{(0)}(-\frac{1}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{4}k_x + i\frac{1}{4}k_y \pm i\frac{\sqrt{3}}{2} \mp \frac{3}{4}k_x \pm \frac{\sqrt{3}}{4}k_y - \frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{4}k_x + i\frac{1}{4}k_y \mp i\frac{\sqrt{3}}{2} \mp \frac{3}{4}k_x \mp \frac{\sqrt{3}}{4}k_y + 1 + ik_y) \\
 & \quad \vdots \\
 \varepsilon_{\pm 1} &= \frac{3}{2}t^{(0)}(\mp k_x + ik_y) = \hbar \underbrace{v_0}_{\equiv \frac{3t^{(0)}a_0}{2\hbar}} (\mp k_x + ik_y)
 \end{aligned}$$

Por otro lado, la expansión a primer orden de ε_0 se muestra a continuación.

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_0 &= t^{(0)}(e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}_1}) = t^{(0)}((1 + i\frac{\sqrt{3}}{2}k_x - i\frac{1}{2}k_y) + (1 - i\frac{\sqrt{3}}{2}k_x - i\frac{1}{2}k_y) + (1 + ik_y)) \\
 & \quad \vdots \\
 \varepsilon_0 &= 3t^{(0)}
 \end{aligned}$$

7.4. Hamiltonianos para grafeno con textura Kekulé y presencia de RSOC

A continuación se muestra el Hamiltoniano (4.16) en forma matricial para la textura Kek-Y con índice $\nu = 1$. Para expresar dicha matriz se define $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$.

$$\mathcal{H}_{Kek-Y} = \begin{pmatrix} 0 & \hbar v_0 k_- & \hbar v_0 \Delta_0 k_- & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hbar v_0 k_+ & 0 & 0 & \hbar v_0 \Delta_0 k_- & -i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} & 0 & 0 & 0 \\ \hbar v_0 \Delta_0 k_+ & 0 & 0 & \hbar v_0 k_- & -i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} \Delta'_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hbar v_0 \Delta_0 k_+ & \hbar v_0 k_+ & 0 & 0 & -i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} \Delta'_0 & -i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} & 0 \\ 0 & i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} & i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} \Delta'_0 & 0 & 0 & \hbar v_0 k_- & \hbar v_0 \Delta_0 k_- & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} \Delta'_0 & \hbar v_0 k_+ & 0 & 0 & \hbar v_0 \Delta_0 k_- \\ 0 & 0 & 0 & i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} & \hbar v_0 \Delta_0 k_+ & 0 & 0 & \hbar v_0 k_- \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \hbar v_0 \Delta_0 k_+ & \hbar v_0 k_+ & 0 \end{pmatrix} \quad (7.1)$$

De manera similar, el Hamiltoniano (4.17) en forma matricial para la textura Kek-O con índice $\nu = 0$ se muestra a continuación.

$$\mathcal{H}_{Kek-O} = \begin{pmatrix} 0 & \hbar v_0 k_- & 3t^{(0)} \Delta_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hbar v_0 k_+ & 0 & 0 & -3t^{(0)} \Delta_0 & -i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} & 0 & 0 & 0 \\ 3t^{(0)} \Delta_0 & 0 & 0 & \hbar v_0 k_- & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -3t^{(0)} \Delta_0 & \hbar v_0 k_+ & 0 & 0 & 0 & -i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} & 0 \\ 0 & i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} & 0 & 0 & 0 & \hbar v_0 k_- & 3t^{(0)} \Delta_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \hbar v_0 k_+ & 0 & 0 & -3t^{(0)} \Delta_0 \\ 0 & 0 & 0 & i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} & 3t^{(0)} \Delta_0 & 0 & 0 & \hbar v_0 k_- \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3t^{(0)} \Delta_0 & \hbar v_0 k_+ & 0 \end{pmatrix} \quad (7.2)$$

7.5. Forma alternativa de los Hamiltonianos para gra- feno con textura Kekulé y presencia de RSOC

Para reescribir (4.16) y (4.17) como (4.18) y (4.19), respectivamente, es necesario reacomodar la base una vez más. La base en la que estan escritos los siguientes Hamiltonianos (4.18) y (4.19) esta dada por $\Psi'_{\mathbf{k}} = (-b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\dagger - b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\dagger - b_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\dagger a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\dagger a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^\dagger b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^\dagger b_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^\dagger)^T$. A continuación se muestra el Hamiltoniano alternativo (4.18) en forma matricial para la textura Kek-Y con índice $\nu = 1$. Para expresar dicha matriz se define $k_\pm = k_x \pm ik_y$.

$$\mathcal{H}_{KY} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \hbar v_0 k_- & 0 & \hbar v_0 \Delta_0 k_- & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} & \hbar v_0 k_- & i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} \Delta'_0 & \hbar v_0 \Delta_0 k_- & 0 & 0 \\ \hbar v_0 k_+ & -i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} & 0 & 0 & 0 & 0 & \hbar v_0 \Delta_0 k_- & 0 \\ 0 & \hbar v_0 k_+ & 0 & 0 & 0 & 0 & i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} \Delta'_0 & \hbar v_0 \Delta_0 k_- \\ \hbar v_0 \Delta_0 k_+ & -i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} \Delta'_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \hbar v_0 k_- & 0 \\ 0 & \hbar v_0 \Delta_0 k_+ & 0 & 0 & 0 & 0 & i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} & \hbar v_0 k_- \\ 0 & 0 & \hbar v_0 \Delta_0 k_+ & -i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} \Delta'_0 & \hbar v_0 k_+ & -i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hbar v_0 \Delta_0 k_+ & 0 & \hbar v_0 k_+ & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.3)$$

De manera similar, el Hamiltoniano alternativo (4.19) en forma matricial para la textura Kek-O con índice $\nu = 0$ en la misma base antes mencionada, se muestra a continuación.

$$\mathcal{H}_{KO} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \hbar v_0 k_- & 0 & 3t^{(0)} \Delta_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} & \hbar v_0 k_- & 0 & 3t^{(0)} \Delta_0 & 0 & 0 \\ \hbar v_0 k_+ & -i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} & 0 & 0 & 0 & 0 & -3t^{(0)} \Delta_0 & 0 \\ 0 & \hbar v_0 k_+ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3t^{(0)} \Delta_0 \\ 3t^{(0)} \Delta_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \hbar v_0 k_- & 0 \\ 0 & 3t^{(0)} \Delta_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} & \hbar v_0 k_- \\ 0 & 0 & -3t^{(0)} \Delta_0 & 0 & \hbar v_0 k_+ & -i\frac{3}{2}\lambda_R^{(0)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3t^{(0)} \Delta_0 & 0 & \hbar v_0 k_+ & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.4)$$