Universidad Autónoma de Coahuila
Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Geometría cuántica en materiales bidimensionales

TESIS PRESENTADA POR:

Luis Eduardo Sánchez González

PARA OBTENER EL TÍTULO DE INGENIERO FÍSICO

DIRECTORES:

Dr. Pierre Anthony Pantaleón Peralta (IMDEA Nanociencia)
Dr. Carlos Eduardo Rodríguez García (UAdeC)

Saltillo, Coahuila, México a 28 de Abril de 2023

Universidad Autónoma de Coahuila

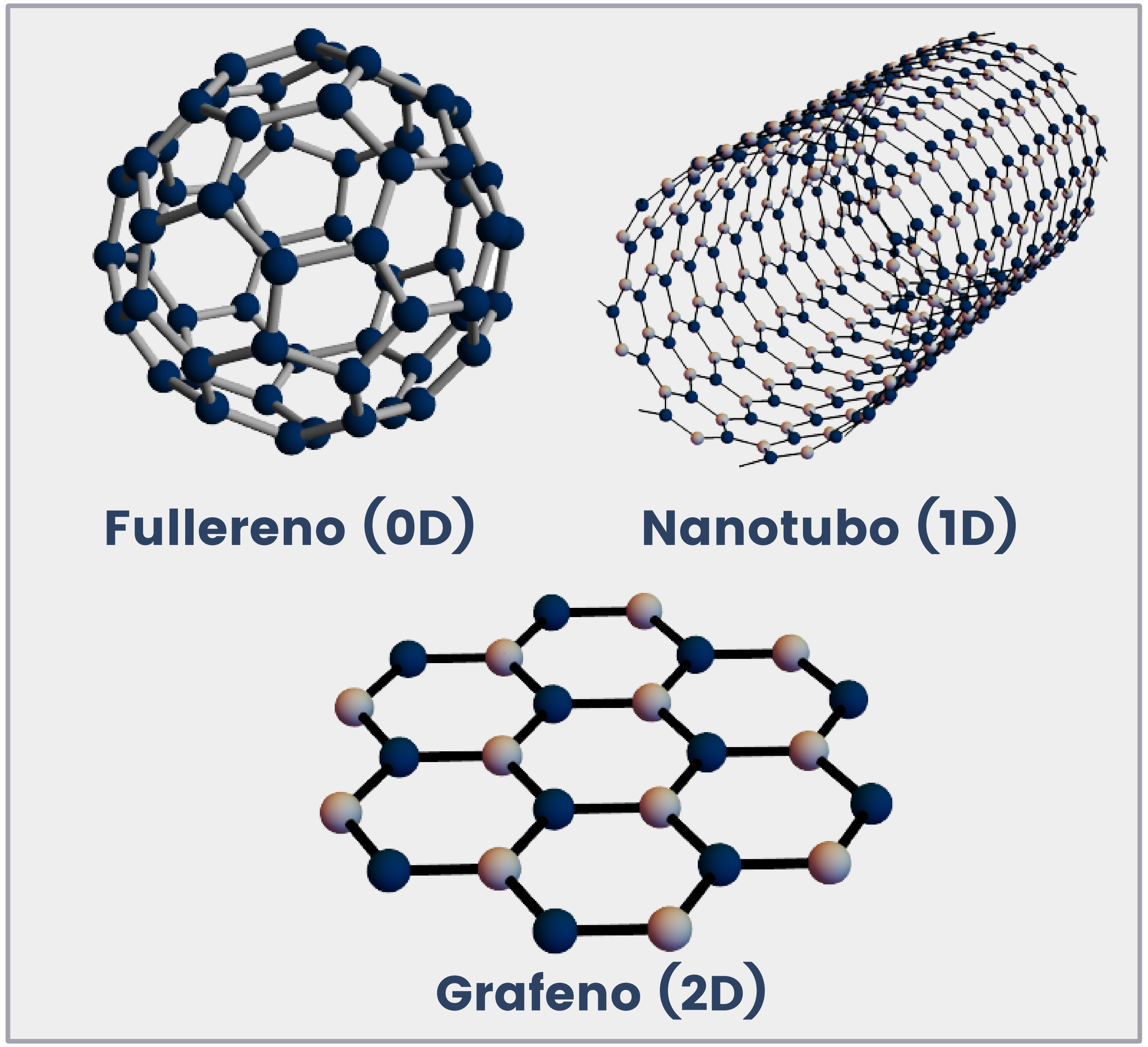
FCFM

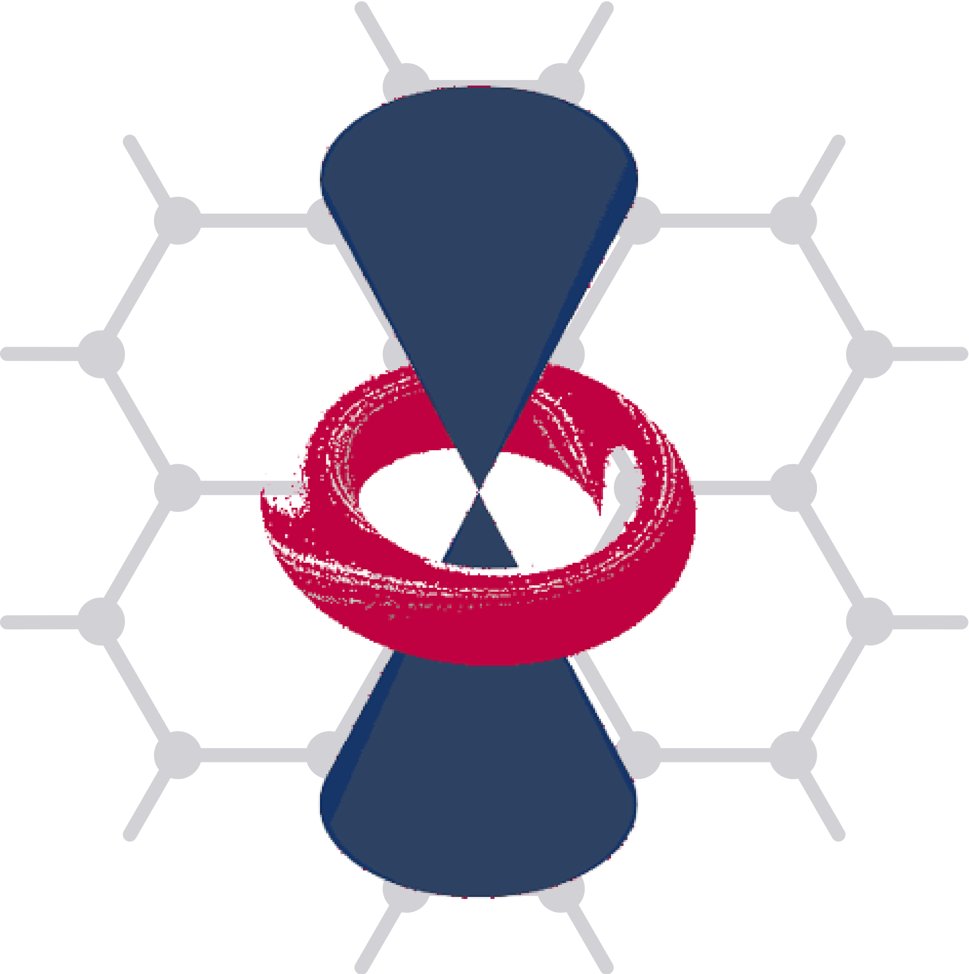
instituto imdea nanociencia

EXCELENCIA SEVERO OCHOA 2017-2021

Tabla de Contenido

Estructuras del carbono





El grafeno cuenta con interesantes propiedades experimentales y teóricas

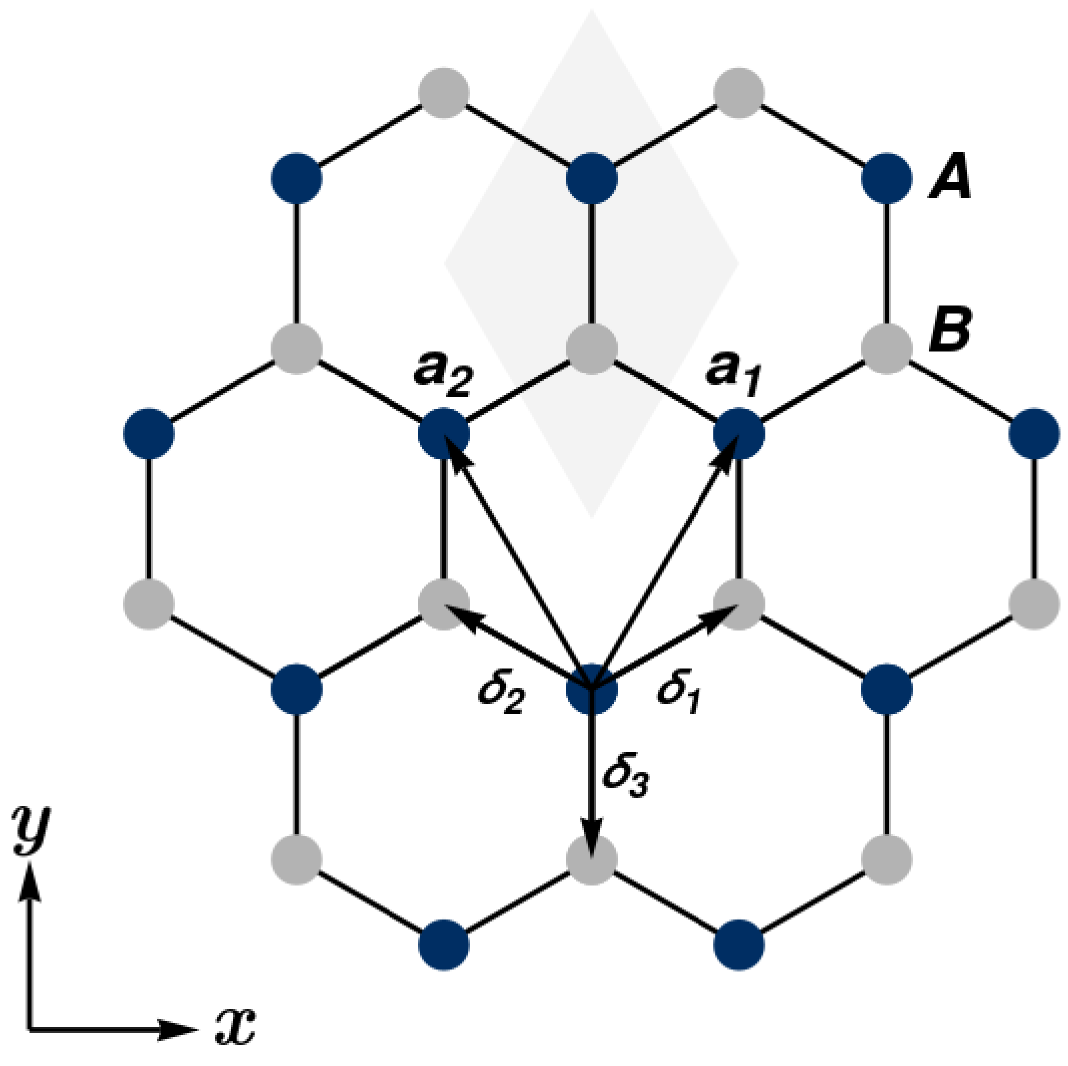
Las propiedades teóricas del grafeno son un puente entre la Física de la Materia Condensada y la Física de Altas Energías.

- K. S. Novoselov, et al., Science **306**, 666 (2004).
- K. S. Novoselov, et al., PNAS **102**, 10451 (2005)
- A. H. Castro Neto, et al., RMP **81**, 109 (2009).
- K. S. Novoselov, et al., Nat. 438, 197 (2005)

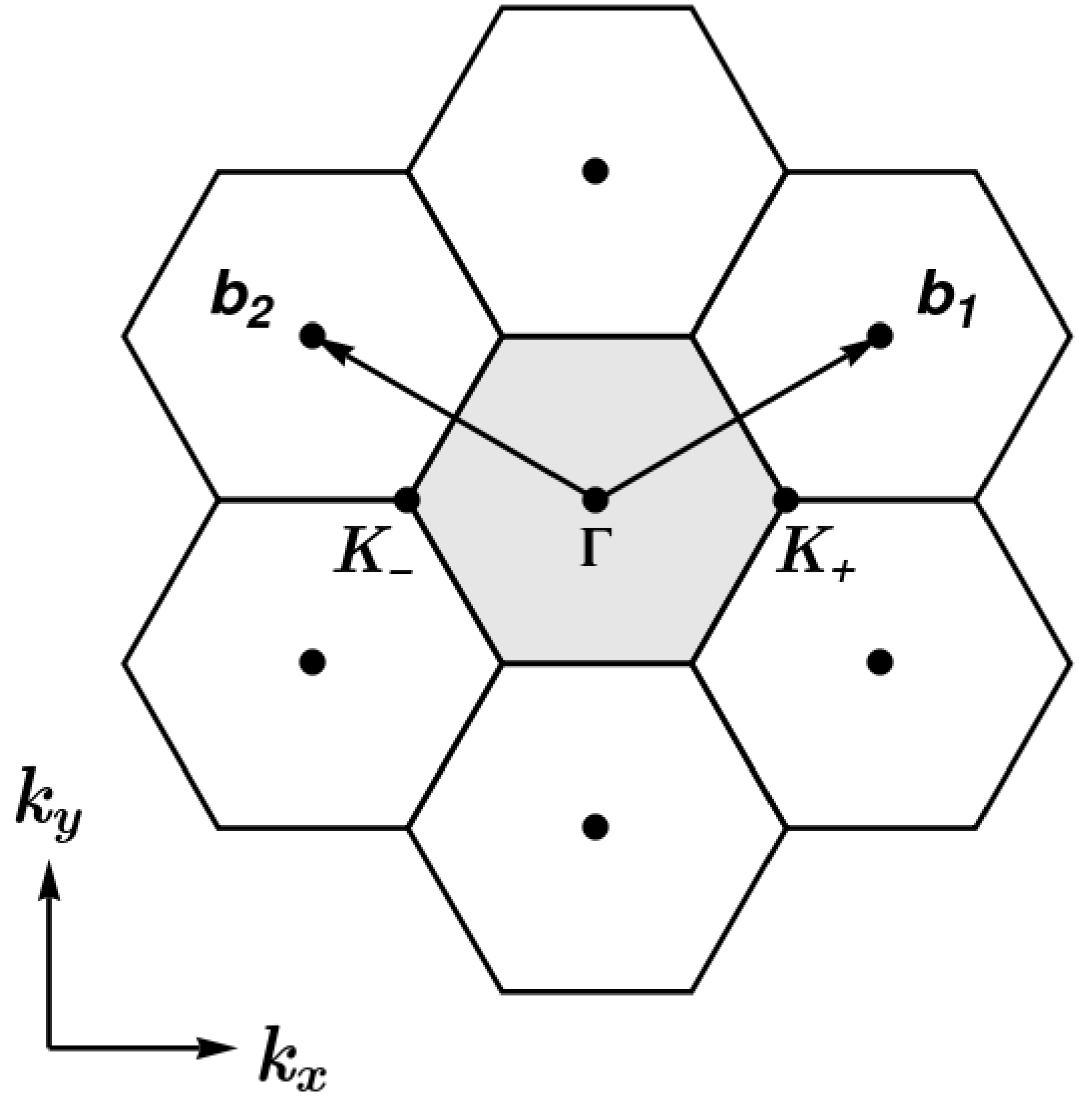
Objetivo general

Explorar las propiedades topológicas de estructuras cristalinas hexagonales. Describiendo los diferentes sistemas obteniendo soluciones analíticas exactas y además mediante soluciones numéricas. Los casos a estudiar son el **grafeno prístino**, **grafeno con masa** y el **modelo de Haldane**.

Estructura cristalina



Red de grafeno



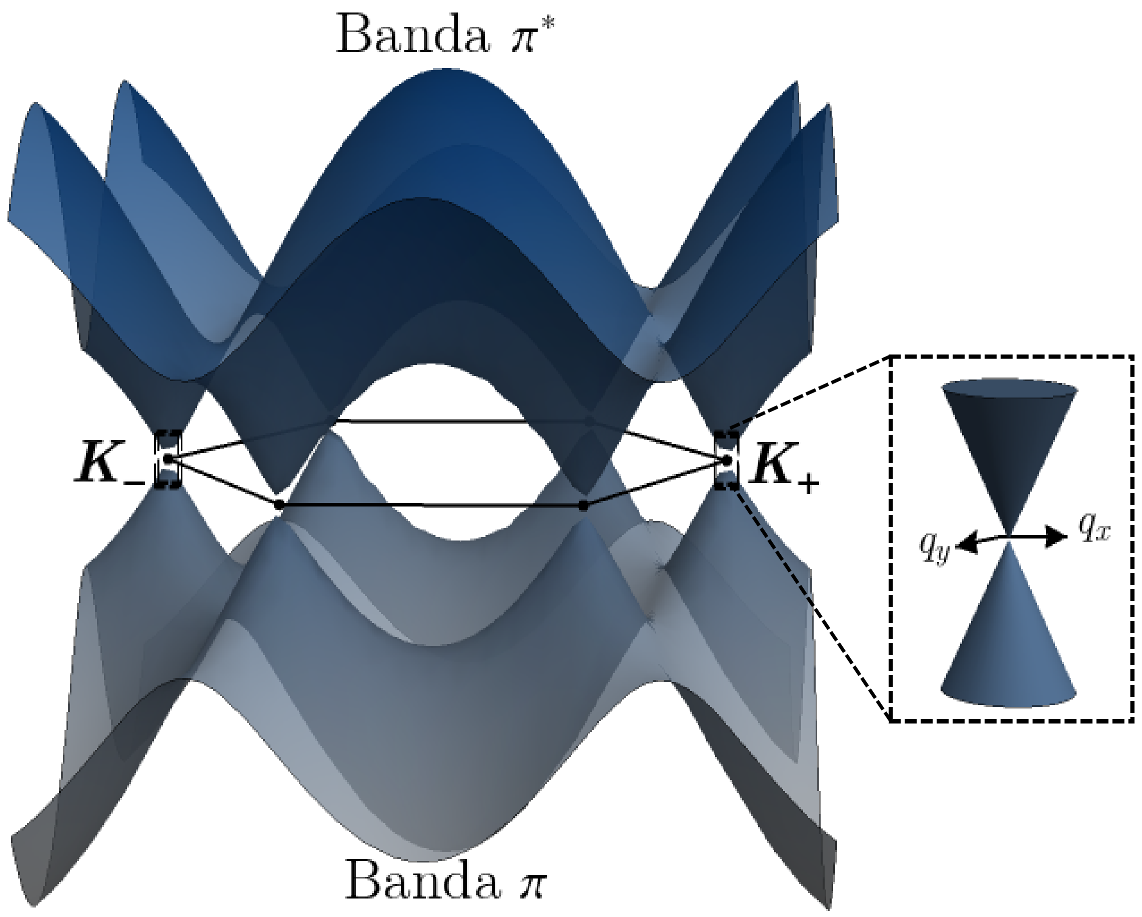
Red recíproca de grafeno

$$\boxed{\boldsymbol{K}_{\pm} = \left(\pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0 \right)}$$

Puntos de Dirac

- P. R. Wallace, PR **71**, 622 (1947).
- A. H. Castro Neto, et al., RMP **81**, 109 (2009).

Modelo de amarre fuerte



Estructura de bandas

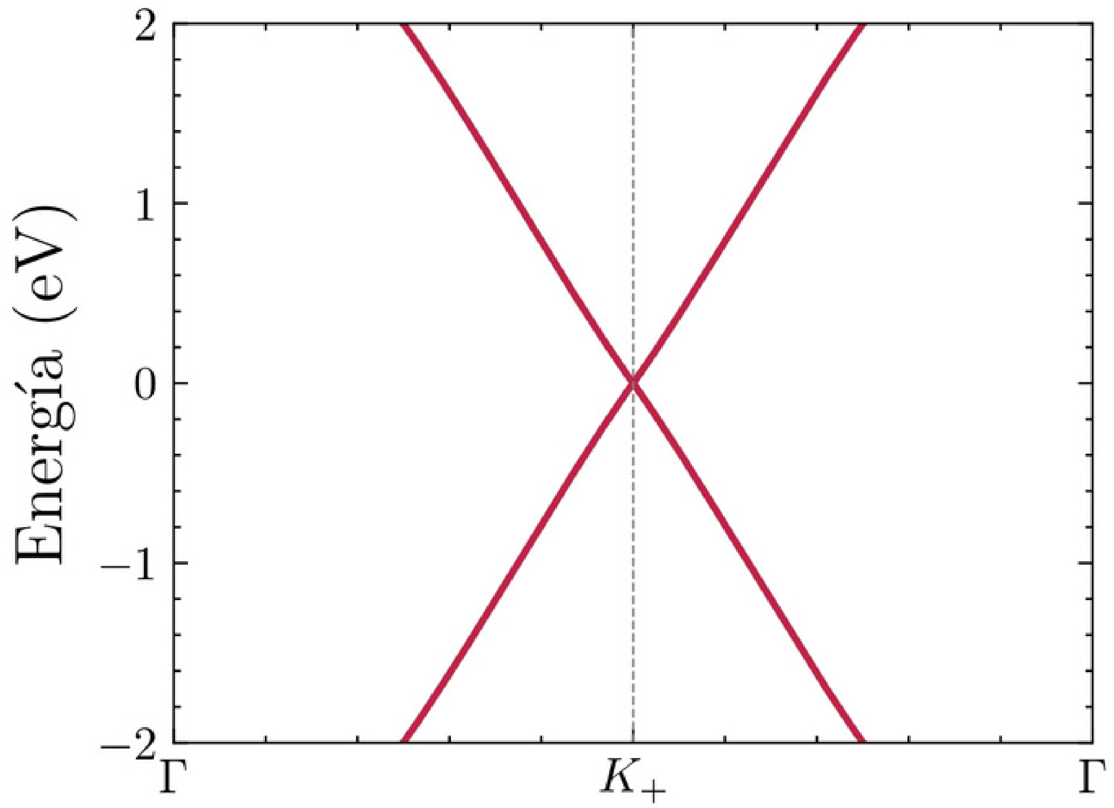
Hamiltoniano de amarre fuerte

$$\boxed{H = -t \sum_{\boldsymbol{r}} \sum_{n=1}^{3} a_{\boldsymbol{r}}^{\dagger} b_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}_n} + \mathrm{H.c.}}$$

Hamiltoniano de Dirac

$$\boxed{\mathcal{H}_\xi(\boldsymbol{q}) = v_F\, \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}_\xi}$$

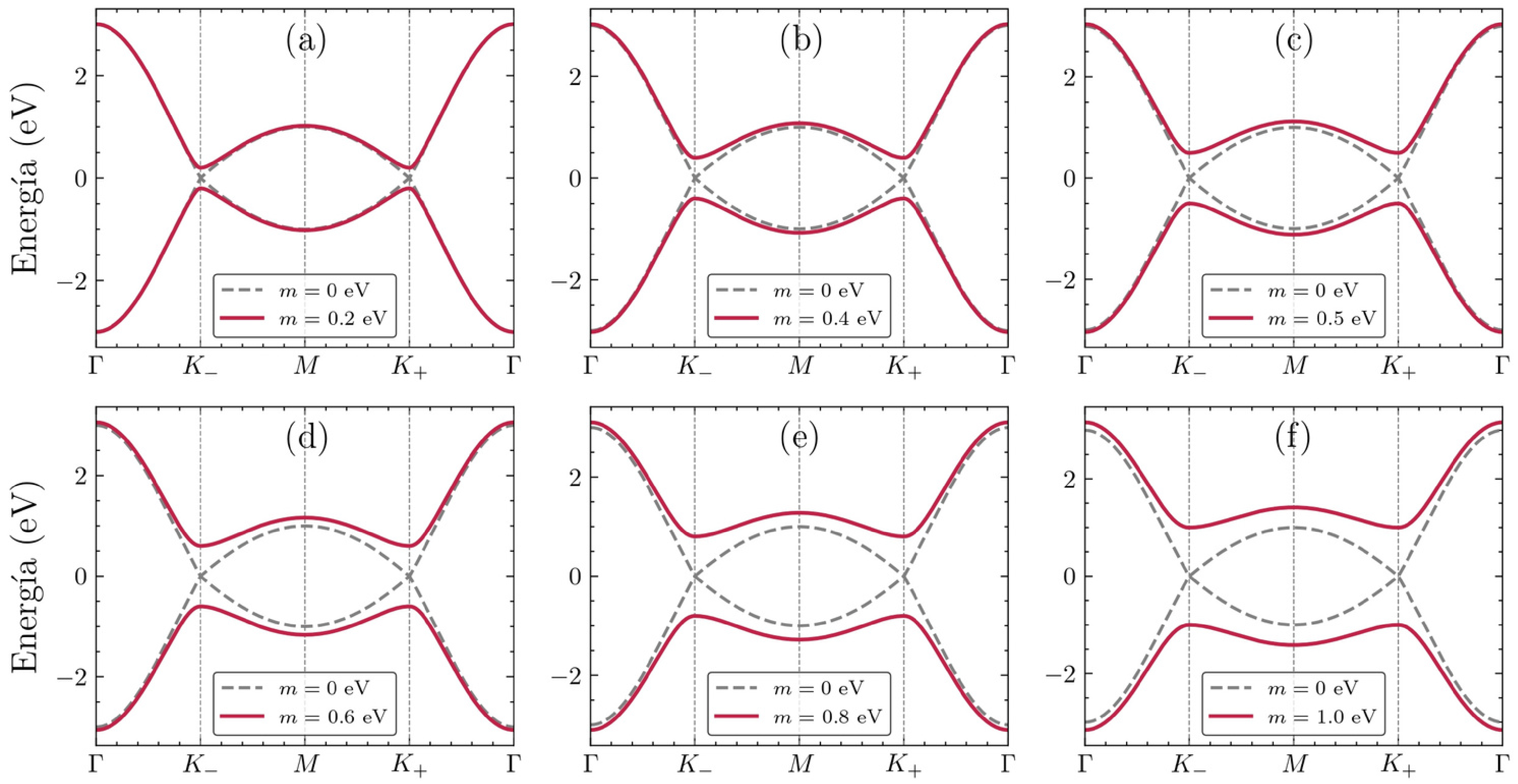
Matrices de Pauli



Relación de dispersión alrededor de K

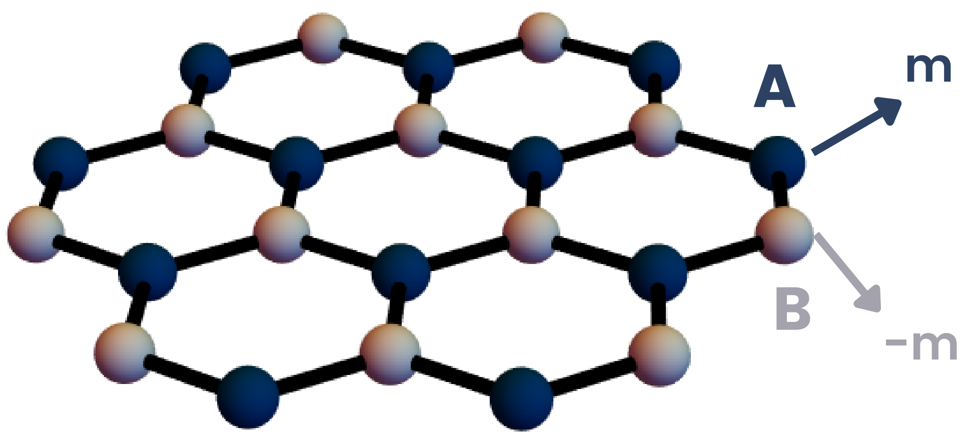
- P. R. Wallace, PR **71**, 622 (1947).
- A. H. Castro Neto, et al., RMP **81**, 109 (2009).
- C. Bena et al., NJP **11**, 095003 (2009).
- S. Reich, et al., PRB **66**, 035412 (2002).
- J. Cayssol et al., JPM **4**, 034007 (2021).

Grafeno con masa



Estructura de bandas electrónicas del grafeno con masa

En el grafeno con masa se añaden energías de sitio -m y m en los átomos A y B que respectivamente.



- G. W. Semenoff, PRL **53**, 2449 (1984).
- G. Cassabois, et al., NP 4 **10**, 262 (2016).
- G. G, et al., PRB -CMMP **76**, 073103 (2007).
- S. Y. Zhou, et al., NM **6**, 770 (2007).
- R. Balog, et al., NM 2010 9:4 **9**, 315 (2010).

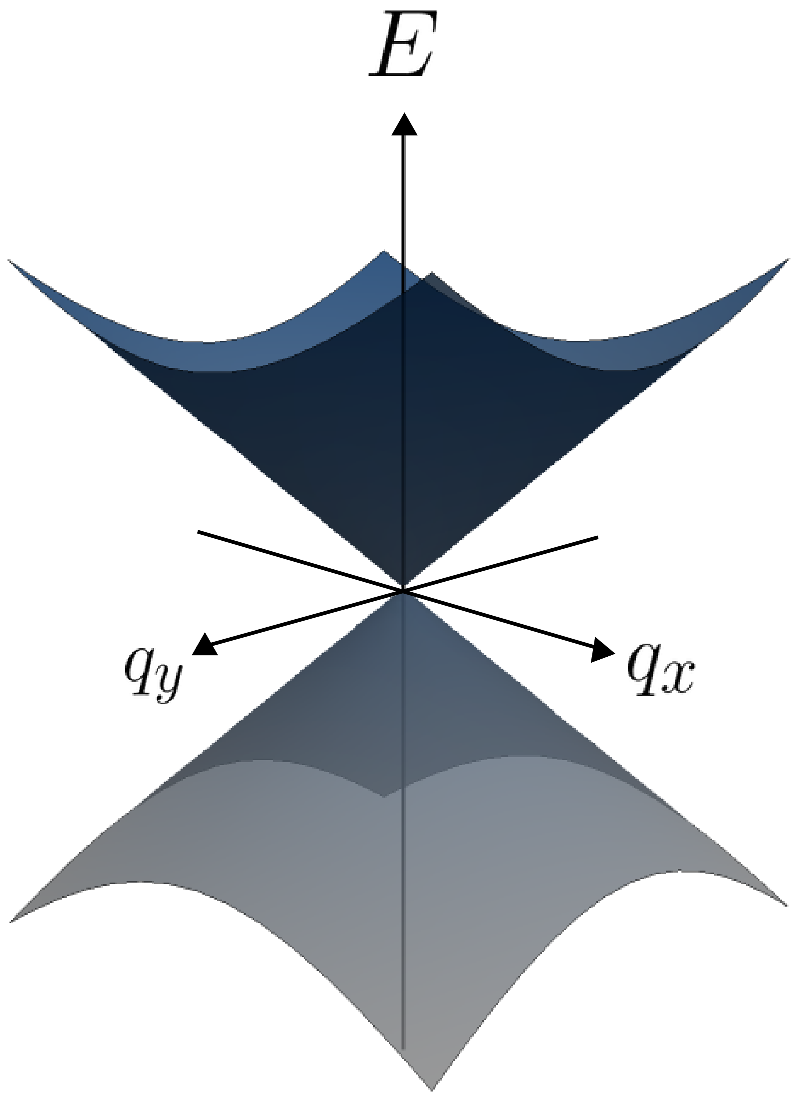
Grafeno con masa

Fermiones de Dirac con masa

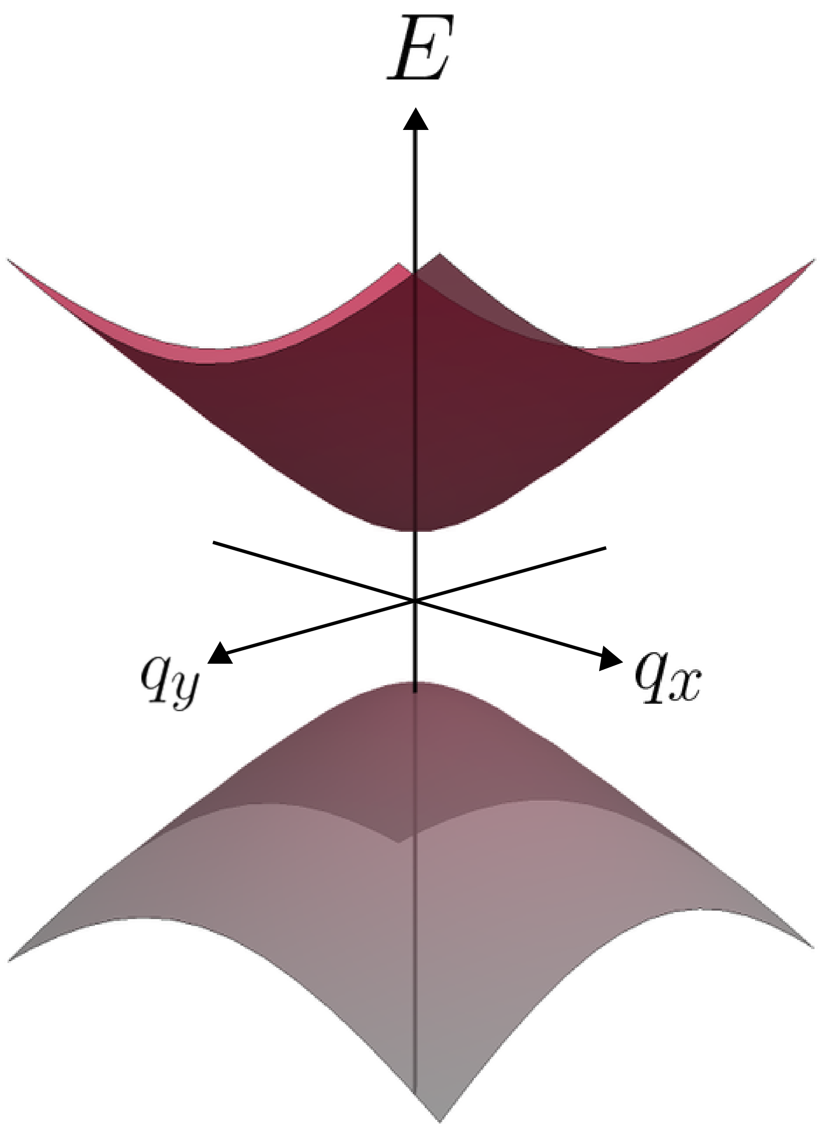
Hamiltoniano de Dirac

$$\boxed{\mathcal{H}_\xi(\boldsymbol{p}) = v_F\, \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}_\xi + m\sigma_z}$$

Si los electrones desarrollan una masa, entonces esto implica la existencia de una brecha de energía



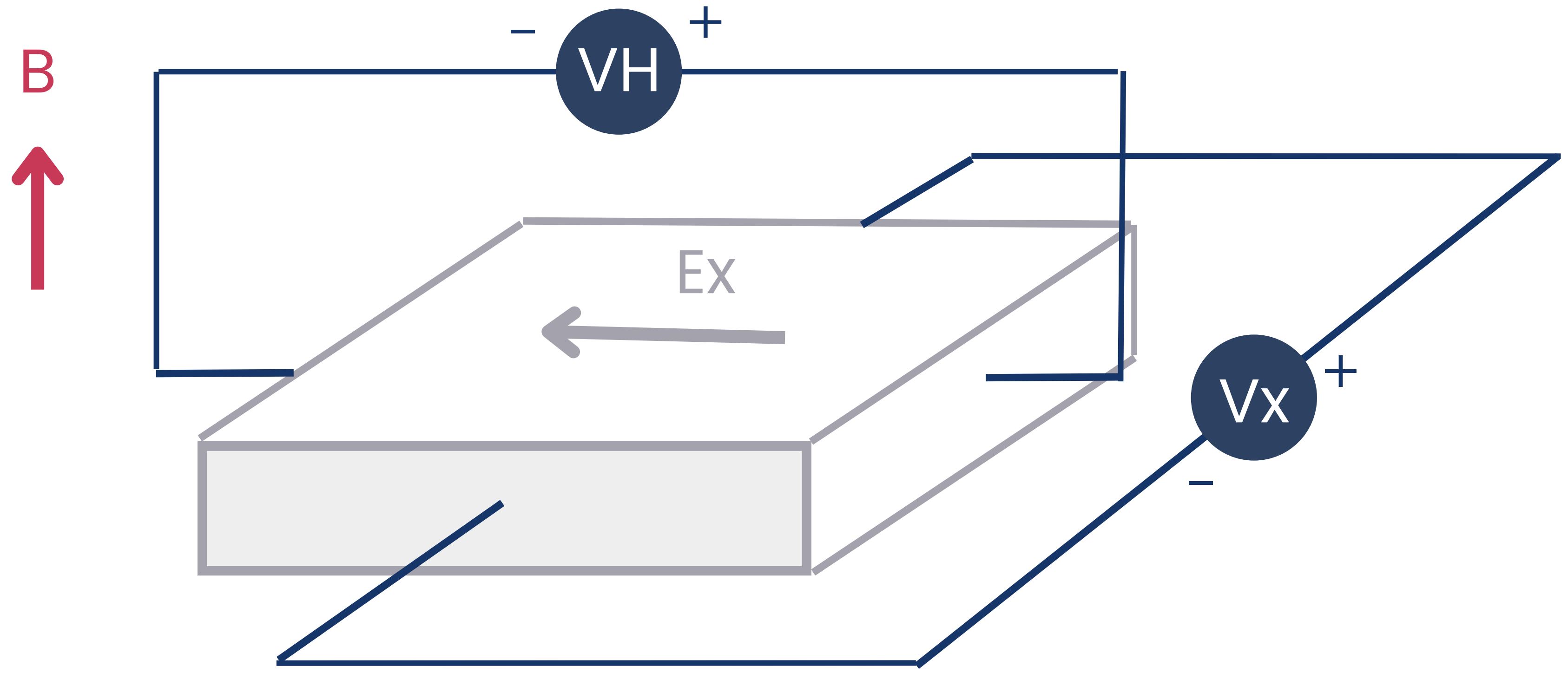
Relación de dispersión de grafeno prístino



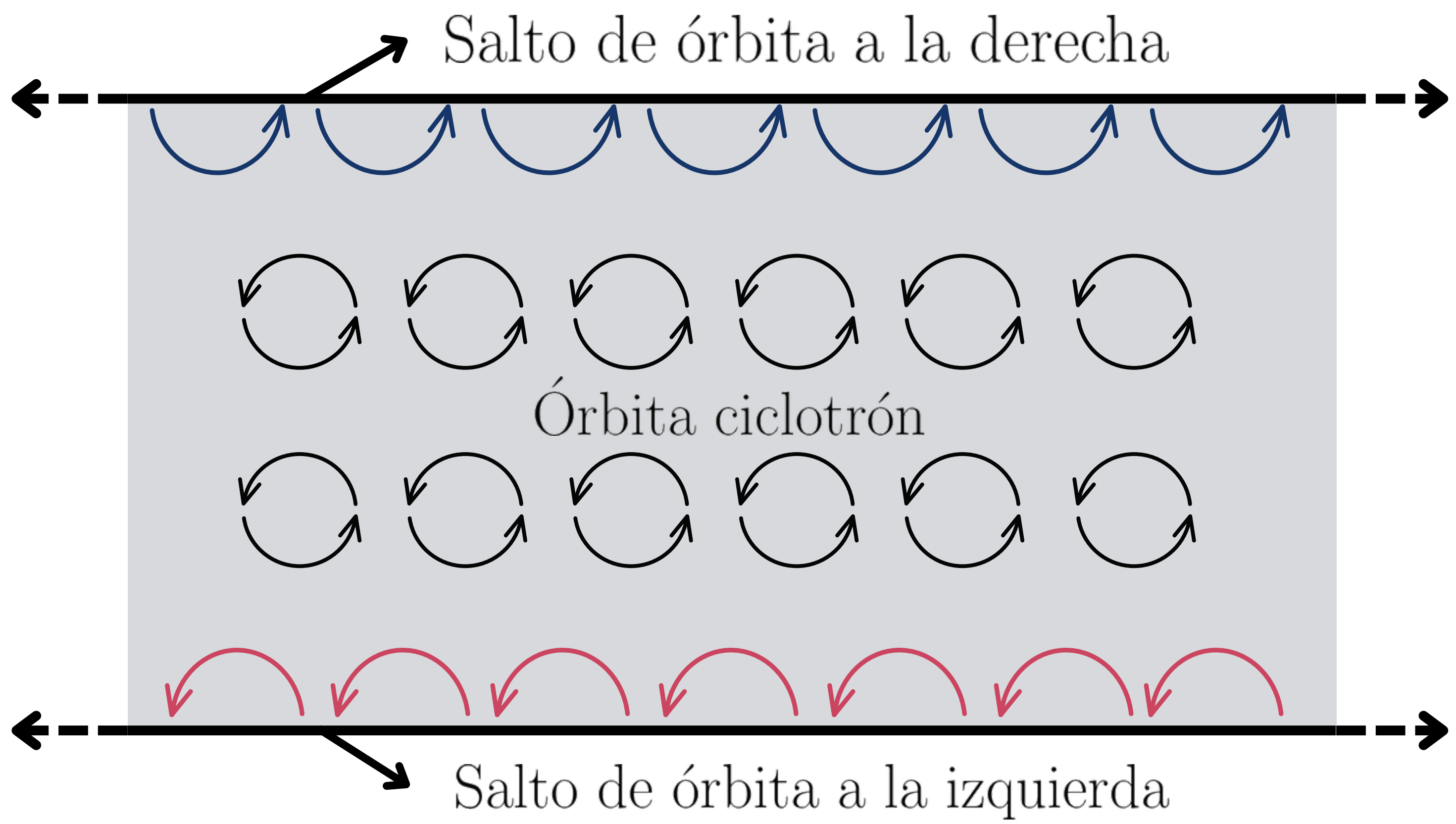
Relación de dispersión de grafeno con masa

- M. S. Fuhrer, Science **340**, 1413 (2013).
- B. Hunt, et al., Science **340**, 1427 (2013)

Modelo de Haldane



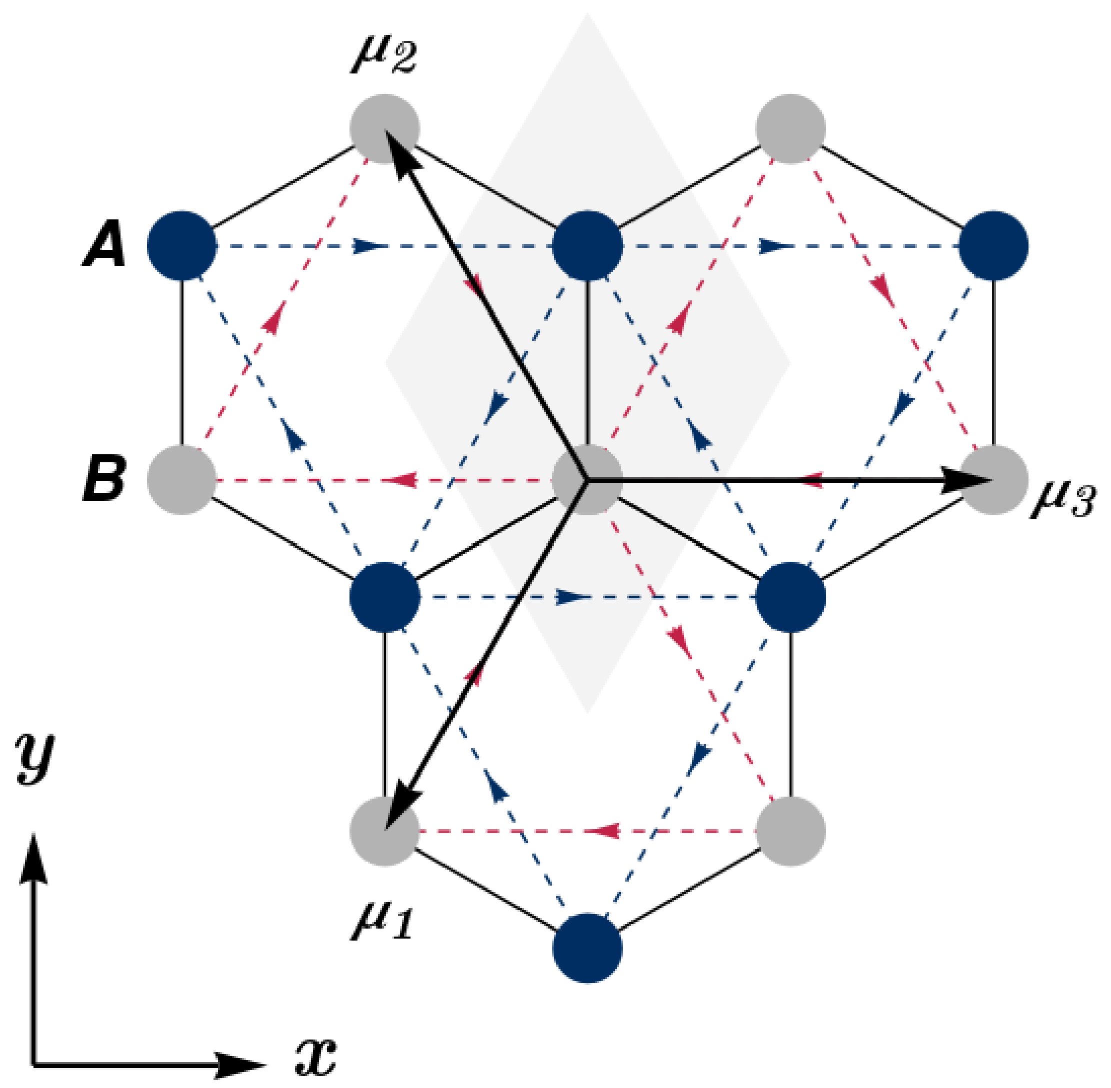
Efecto Hall clásico



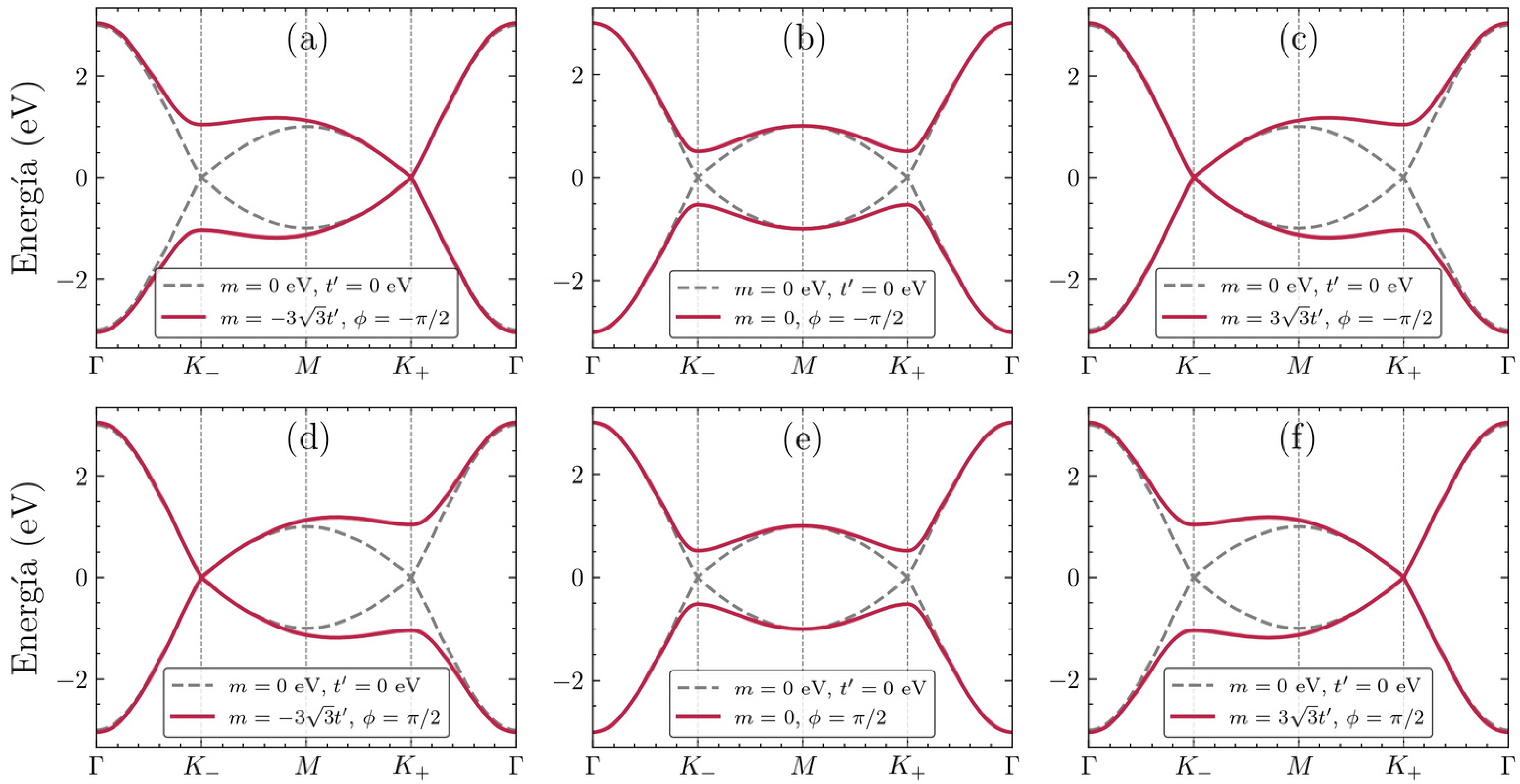
Estados de borde en efecto Hall cuántico

- K. V. Klitzing, et al., PRL **45**, 494 (1980).
- D. J. Thouless, et al., PRL. **49**, 405 (1982).
- F. D. Haldane, PRL. 61, 2015 (1988).

Modelo de Haldane



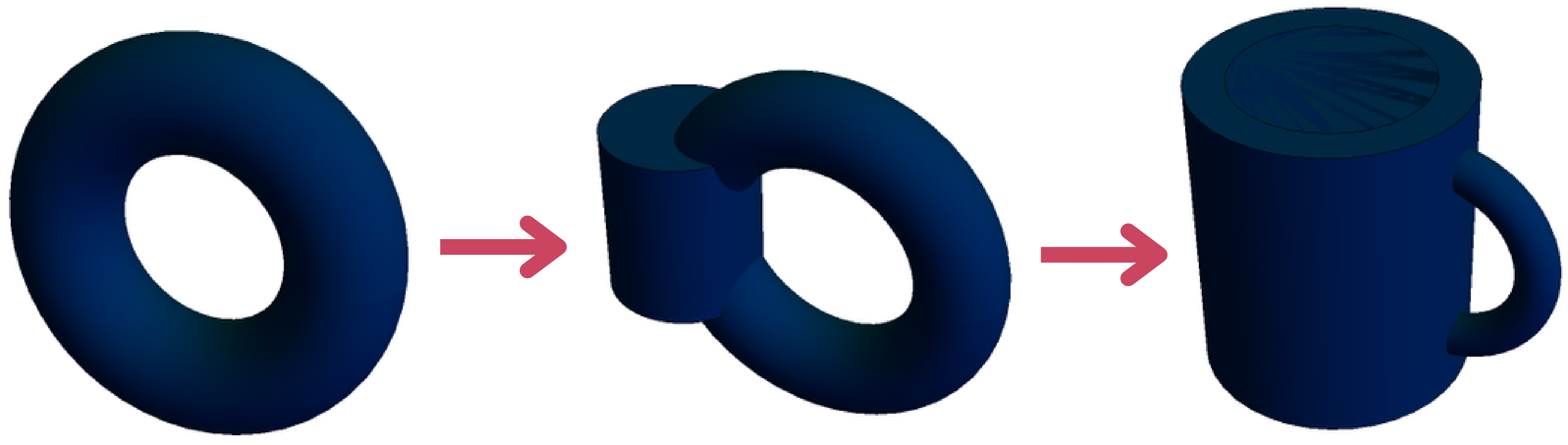
Patrón de saltos a segundos vecinos



Estructura de bandas electrónicas del modelo de Haldane

- F. D. Haldane, PRL. 61, 2015 (1988).
- N. Hao, et al., PRB 78, 075438 (2008).
- C. Z. Chang, et al., Science **340**, 167 (2013).
- G. Jotzu, et al., Nature **515**, 237 (2014).
- H. S. Kim et al., QM 2017 2:1 **2**, 1 (2017)

Teoría geométrica de bandas



Ejemplo típico en topología

Fase de Berry

$$\gamma^{\alpha} = \frac{1}{2}\int_{S} \Omega^{\alpha}_{\mu\nu}\, dk^{\mu} \wedge dk^{\nu}$$

Número de Chern

$$C^{\alpha} = 2\pi\gamma^{\alpha}$$

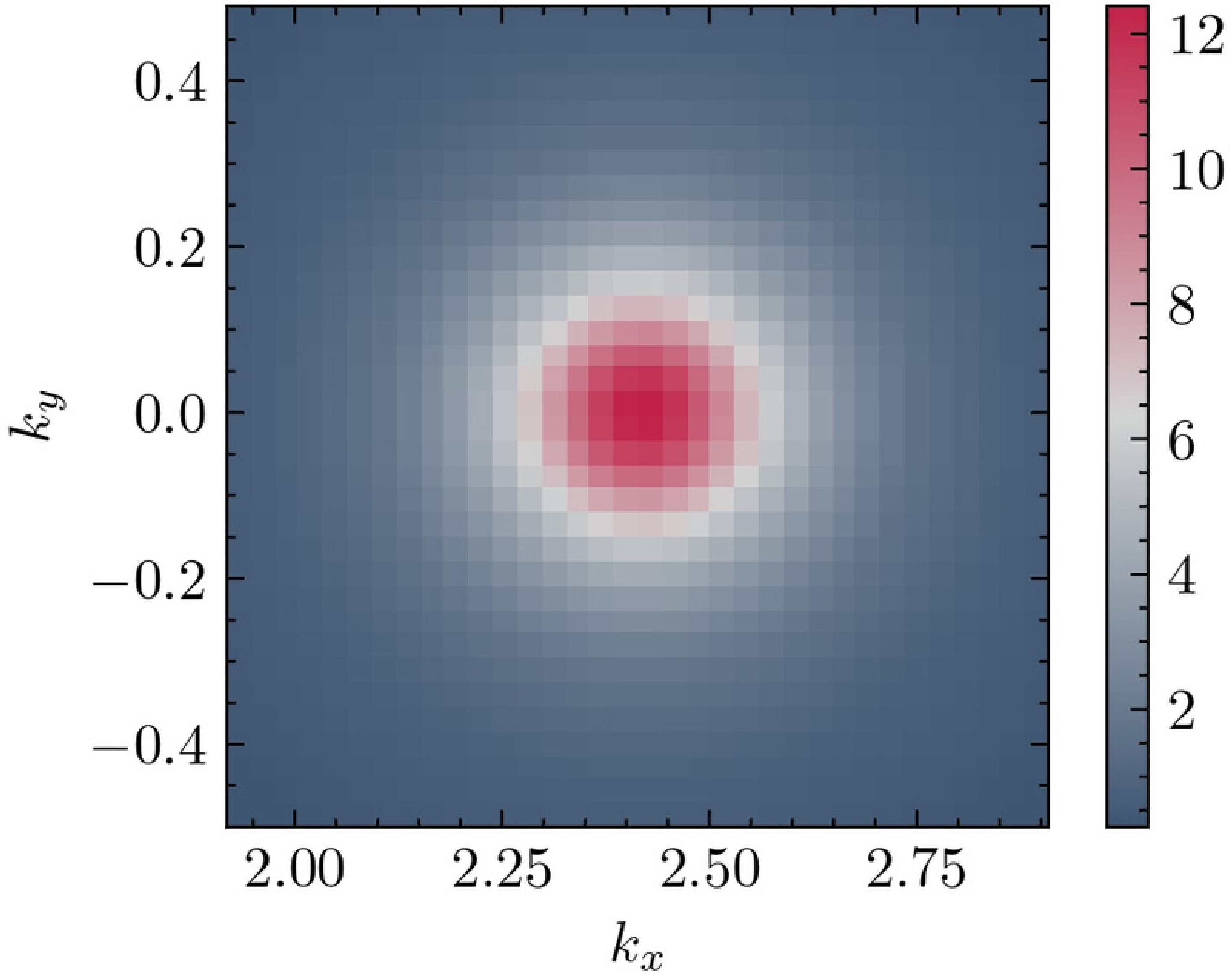
$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{\hbar}\nu, \qquad \nu \in \mathbb{Z} \qquad \sigma_{xy} = \frac{e^2}{\hbar}\sum_{\alpha}\gamma^{\alpha}$$

Conductividad Hall

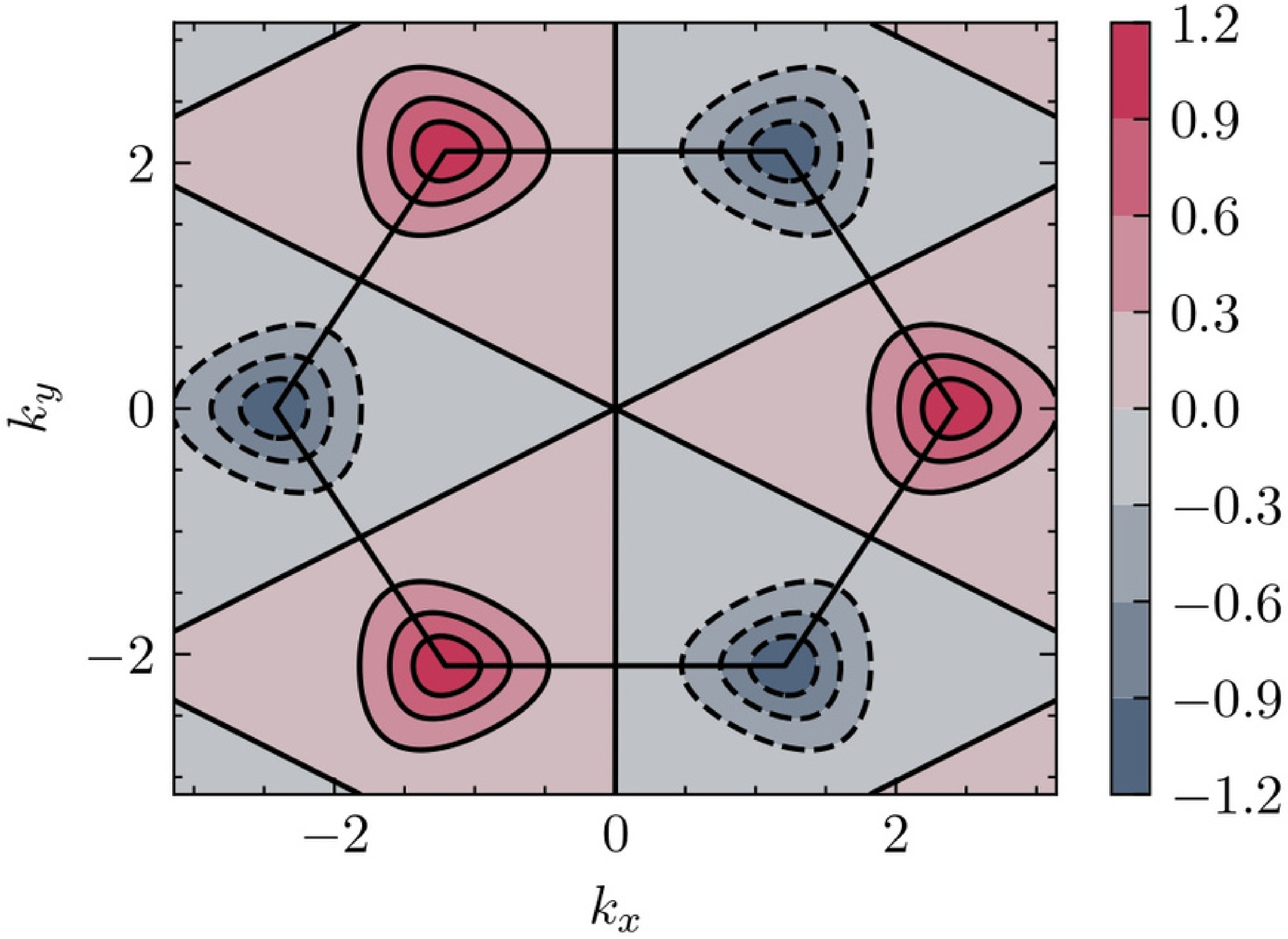
El número de Chern
tiene gran relevancia, debido a que está intrínsecamente relacionado con los estados de borde en materiales finitos.

- D. Xiao, et al., RMP 82, 1959 (2010).
- K. V. Klitzing, et al., PRL **45**, 494 (1980).
- R. B. Laughlin, PRB **23**, 5632 (1981).
- D. J. Thouless, et al., PRL. **49**, 405 (1982).
- B. Simon, PRL. **51**, 2167 (1983).
- M. V. Berry, PRSL. A. MPS 392, 45 (1984).

Número de Chern
Grafeno prístino y grafeno con masa



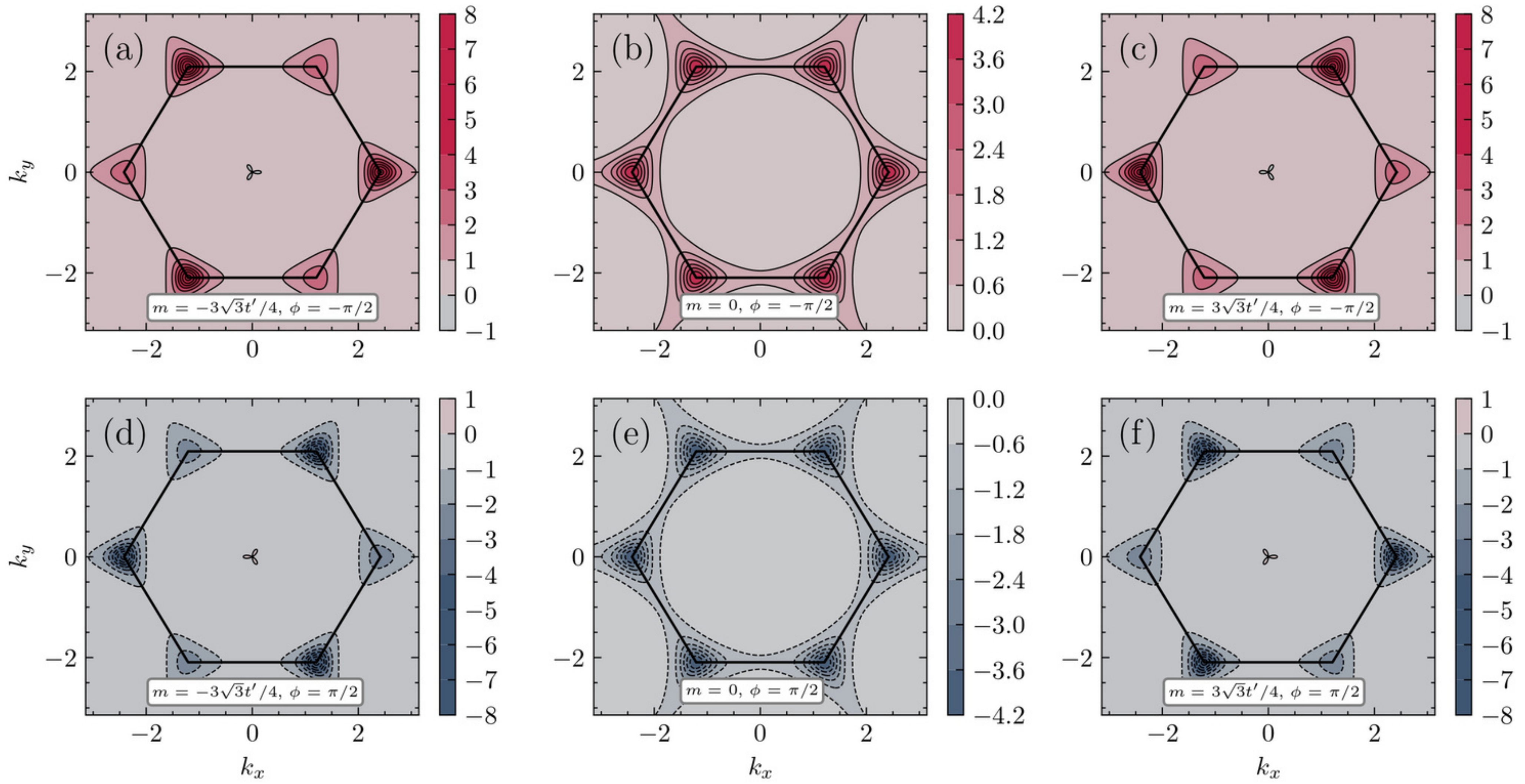
Curvatura de Berry de grafeno prístino



Curvatura de Berry de grafeno con masa

- Y. Zhang, et al., Nature **438**, 201 (2005).
- C. Hwang, et al., PRB 84, 125422 (2011).

Número de Chern
Modelo de Haldane



Curvatura de Berry

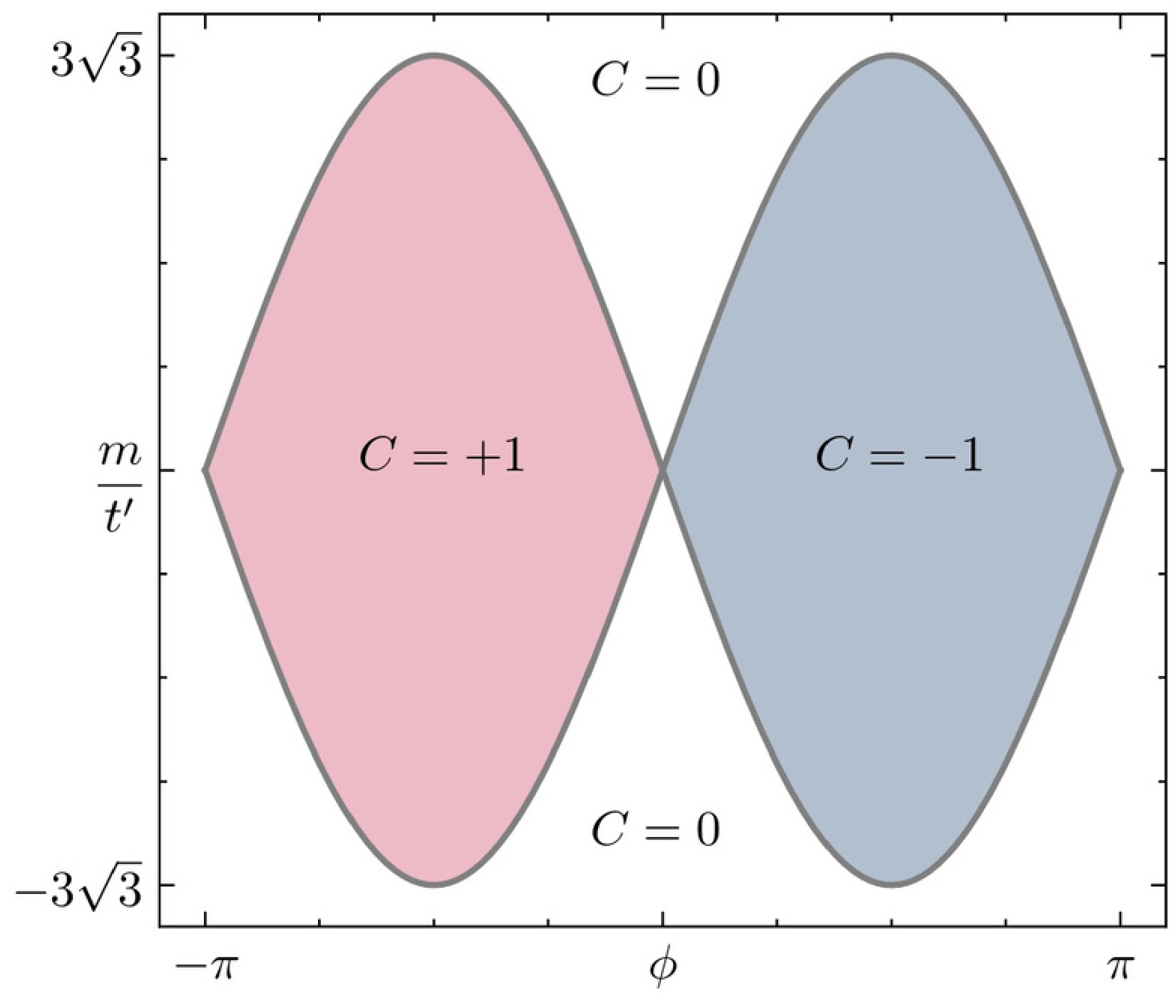
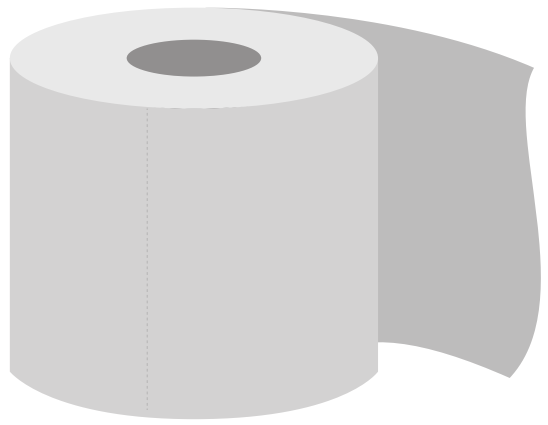


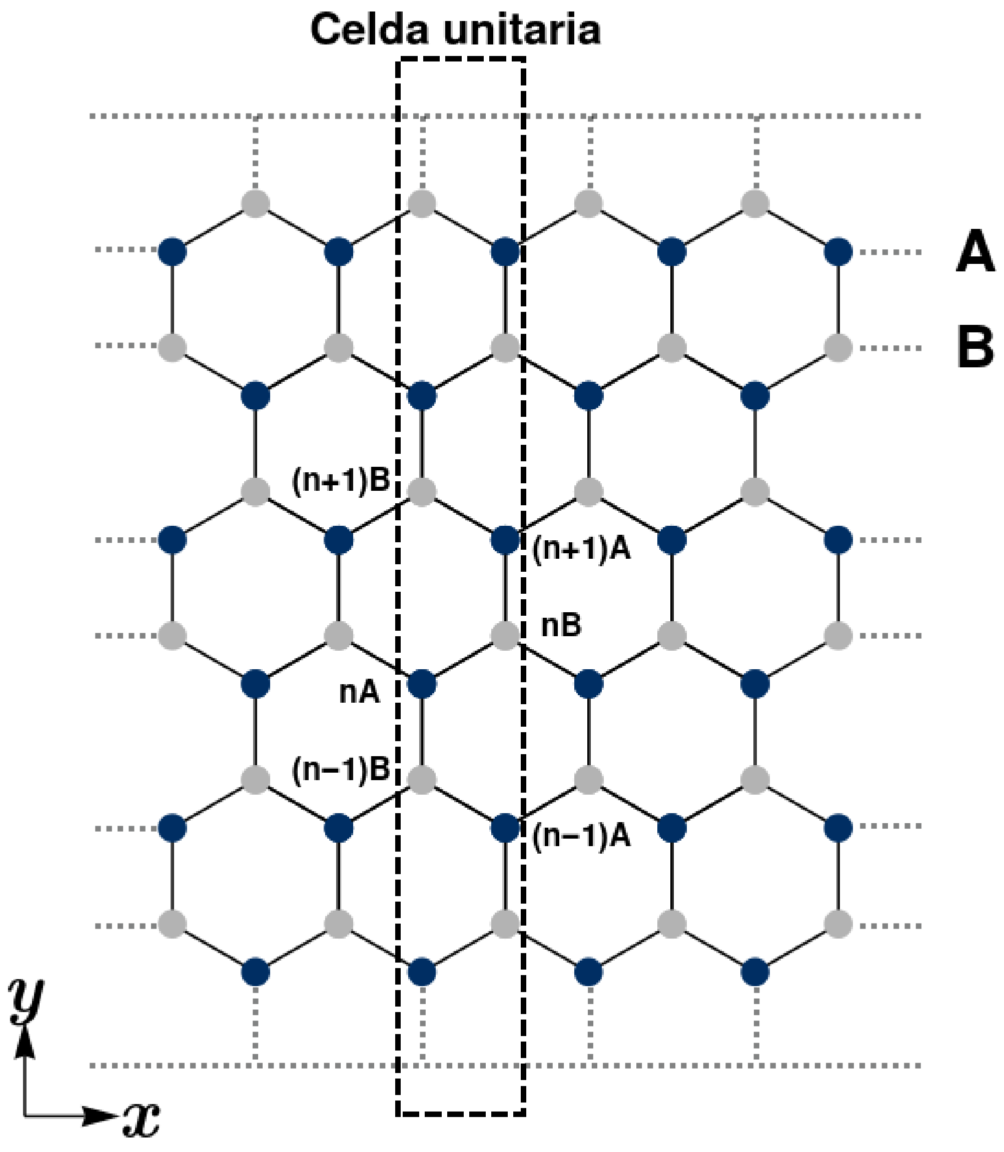
Diagrama de fase

- D. Sticlet, et al., PRB **85**, 165456 (2012).
- C.-H. Lin et al., JPC **2**, 085014 (2018).

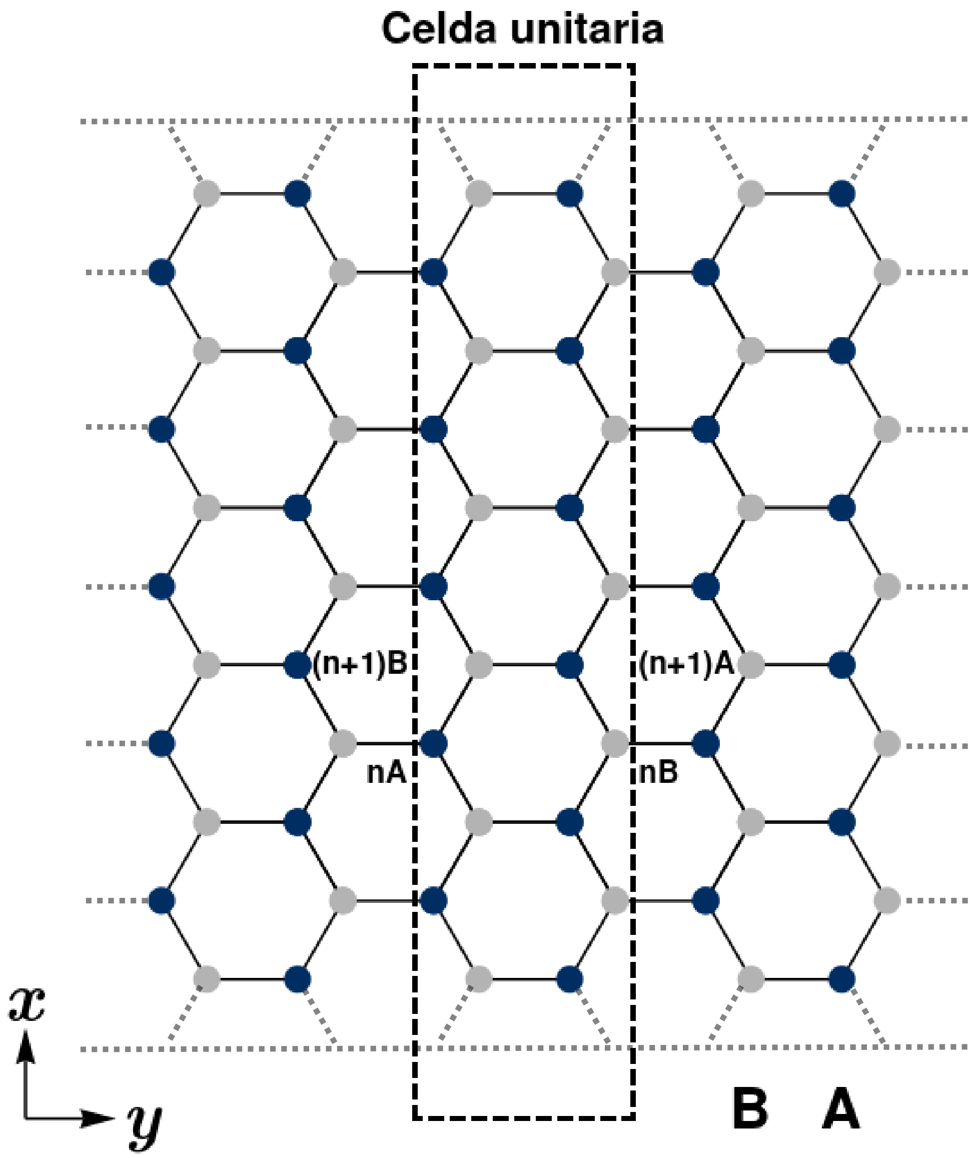
Nanocintas de grafeno

Las nanocintas son redes periódicas en una dirección pero finita en la otra. Podemos imaginarlo como un rollo de papel





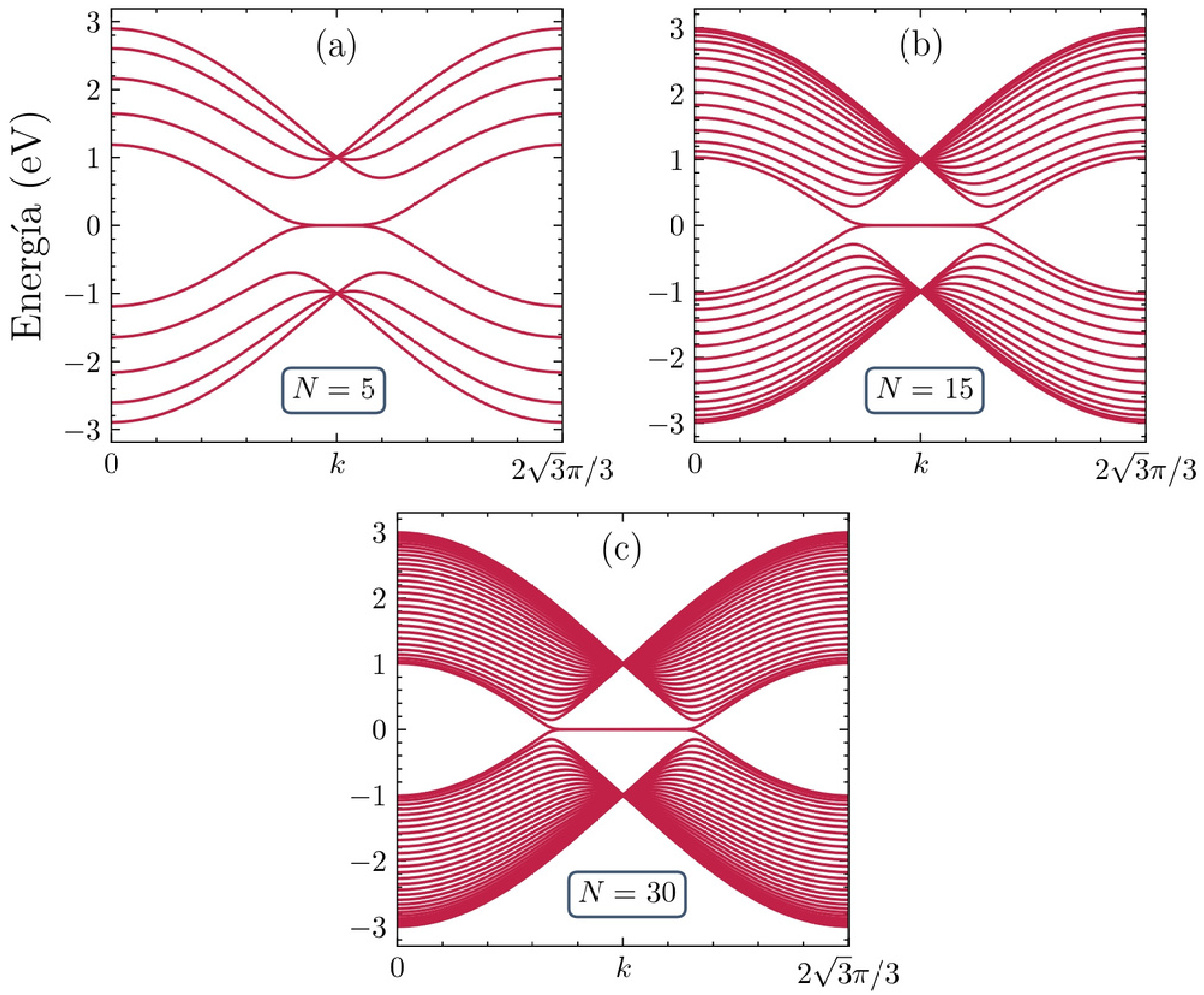
Nanocinta con borde zigzag



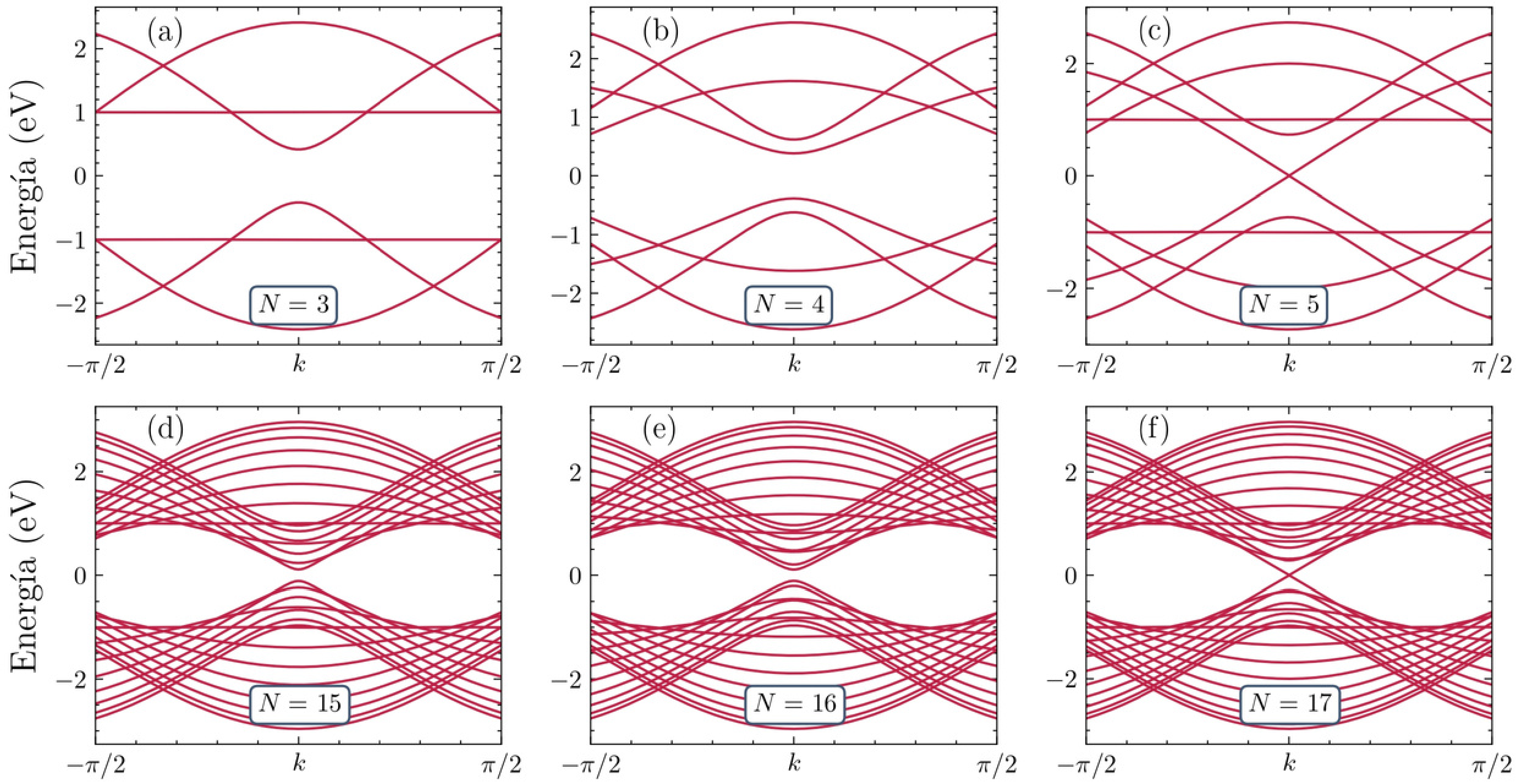
Nanocinta con borde armchair

- M. Fujita, et al. JPSJ **65**, 1920 (1996).
- K. Nakada, et al., PRB **54**, 17954 (1996).
- K. Wakabayashi, et al., PRB **59**, 8271 (1999).
- C. H. Chiu et al., PRB **85**, 155444 (2012).
- P. A. Maksimov, et al. PRB **88**, 245421 (2013).

Nanocintas de grafeno



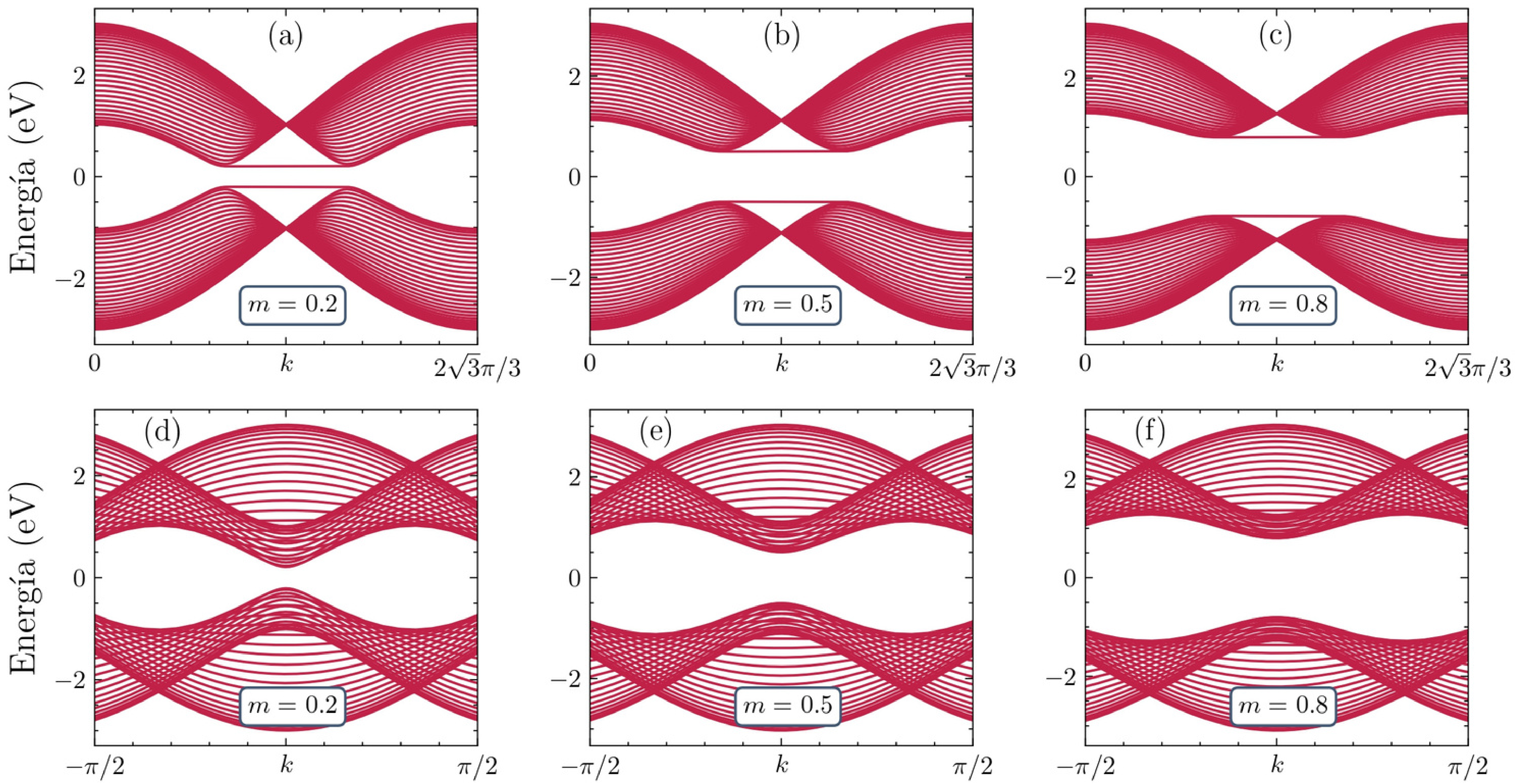
Estructura de bandas con borde zigzag



Estructura de bandas con borde armchair

- M. Fujita, et al. JPSJ **65**, 1920 (1996).
- K. Nakada, et al., PRB **54**, 17954 (1996).
- K. Wakabayashi, et al., PRB **59**, 8271 (1999).
- C. H. Chiu et al., PRB **85**, 155444 (2012).
- P. A. Maksimov, et al. PRB **88**, 245421 (2013).
- K. Wakabayashi, et al., STAM 11, 054504 (2010).

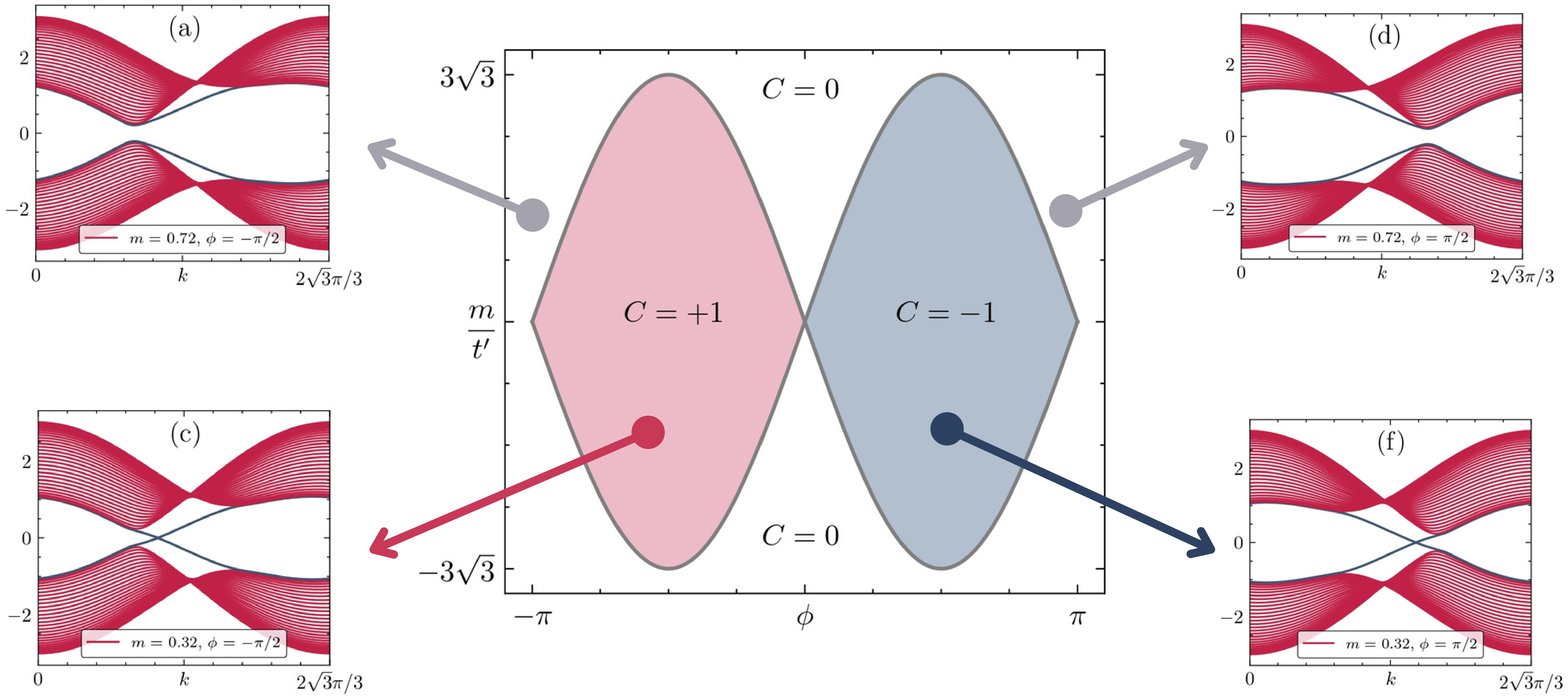
Nanocintas de grafeno con masa



Estructura de bandas con borde zigzag (superior) y con borde armchair (inferior)

Esto confirma que el grafeno con masa es un aislante trivial.

Correspondencia bulto-frontera
Modelo de Haldane



- F. D. Haldane, PRL. 61, 2015 (1988).
- N. Hao, et al., PRB 78, 075438 (2008).

Conclusiones

En este trabajo se realizó un estudio detallado de las propiedades electrónicas y topológicas de tres tipos de sistemas de grafeno, prístino, con masa y tipo Haldane. Se encontraron soluciones analíticas para la estructura de bandas y sus correspondientes funciones de onda. La fase de Berry y su correspondiente número de Chern se obtuvieron analítica y numéricamente para describir las diferentes fases topológicas de cada sistema.

Adicionalmente, se estudió cada sistema en su representación finita y se describió la correspondencia bulto-frontera. Se evidenció que las propiedades topológicas de cada sistema están relacionadas con la existencia o no de estados de borde.

Finalmente, el estudio profundo de las propiedades de materiales bidimensionales es importante para su aplicación en tecnología y permite una mejor comprensión de los fenómenos físicos en sistemas complejos. Aunado a esto, el nivel de detalle con el que se ha descrito cada sistema, permite una comprensión más profunda y sistemática de sus propiedades topológicas y electrónicas.

¡Muchas gracias!