Materiales de Dirac

Luis Eduardo Sánchez González
luis-sanchez@uadec.edu.mx

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas
Universidad Autónoma de Coahuila

Saltillo, Coahuila   Mayo 2023

Seminario de Estudiantes
F C F M

FCFM

Seminario de Estudiantes
F C F M

Agradecimientos

Dr. Pierre A. Pantaleón

Grupo de Física Teórica, Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Nanociencia (IMDEA), Madrid, España

Dr. Ramón Carrillo Bastos

Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Baja California, Baja California, México

instituto imdea nanociencia

EXCELENCIA SEVERO OCHOA 2017-2021

POR LA REALIZACIÓN PLENA DEL SER
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

Seminario de Estudiantes
F C F M

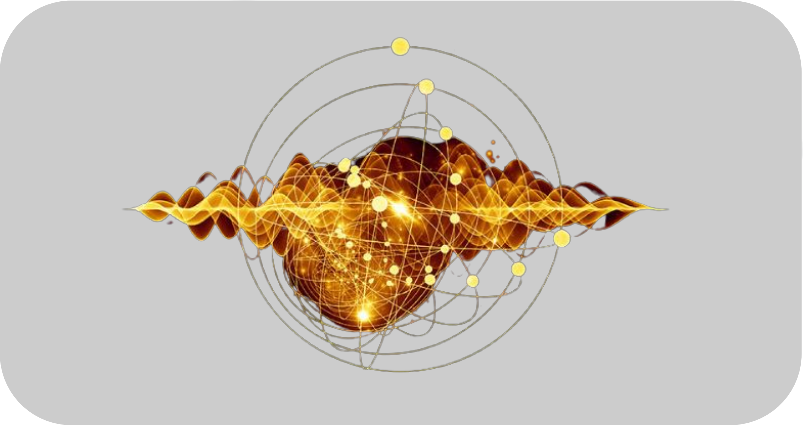
Contenido

- **Introducción**
  - Un poco de contexto
  - Breve repaso de relatividad
  - Ecuación de Dirac
- **Materiales bidimensionales**
  - Electrones en un cristal
  - Descubrimiento de materiales 2D: Grafeno
  - Electrones ultrarelativistas en grafeno
- **Otro materiales de Dirac**
  - Modelo α-T_3 o red de dados
  - Grafeno con distorsión Kekulé
  - Modelo α-T_3 con periodicidad Kekulé

Seminario de Estudiantes
F C F M

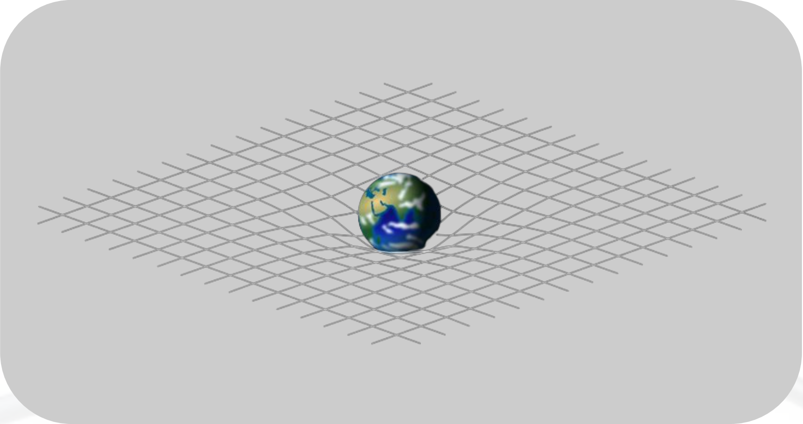
Un poco de contexto

En la física moderna existen dos principales subramas:



Mecánica Cuántica

Relatividad general

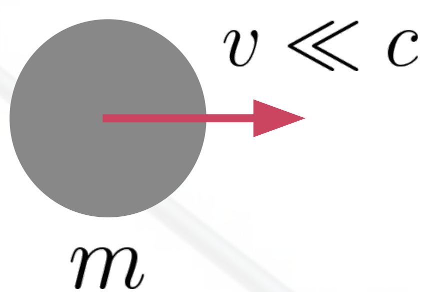


Seminario de Estudiantes
F C F M

Breve repaso de relatividad

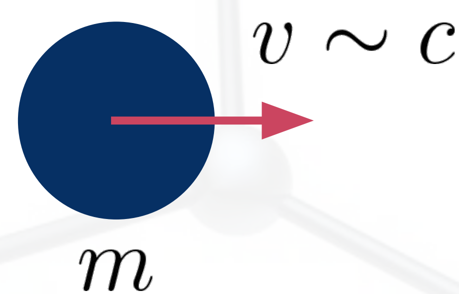
Mecánica Clásica

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$



Mecánica Relativista

$$E = \sqrt{(pc)^2 + (mc^2)^2}$$



Seminario de Estudiantes
F C F M

Ecuación de Dirac

Ecuación de Schrödinger

La ecuación de Schrödinger gobierna el comportamiento de los sistemas cuánticos, está dada por

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r})$$

Para una partícula libre la energía es

$$p = \hbar k \qquad \Rightarrow \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Postulado de de Broglie **Energía**

Seminario de Estudiantes
F C F M

Ecuación de Dirac

Primer intento: Ecuación de Klein-Gordon

Si tomamos la ecuación de Schrödinger y sustituimos la energía *E* por la energía relativista tendremos que

$$\sqrt{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + m^2c^4\right]}\ \psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r})$$

Pero, **¿cómo resolver esto?.** No resulta sencillo y mucho menos trivial.

Luego se encontró que está ecuación es de utilidad en ciertos casos específicos, es conocida como la ecuación de Klein-Gordon.

Seminario de Estudiantes
F C F M

Ecuación de Dirac

Primer intento: Ecuación de Klein-Gordon

Considerando las cuestiones relativistas, podemos encontrar la ecuación de Klein-Gordon

$$\left[\nabla^2 - \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right]\psi(\boldsymbol{r}) = 0$$

No obstante, esta ecuación presenta problemas de interpretación:

$$E = \pm\sqrt{p^2 + m^2} \qquad \Rightarrow \qquad \rho \propto 2E \quad !$$

Soluciones negativas **Probabilidad negativa**

Seminario de Estudiantes
F C F M

Ecuación de Dirac

Segundo intento: Ecuación de Dirac

Una pregunta interesante en matemáticas es, ¿es verdadera la siguiente proposición?

$$(ax+by)^2 = x^2 + y^2$$

En primer lugar tenemos que

$$(ax+by)(ax+by) = a^2x^2 + b^2y^2 + 2abxy$$

Entonces, si la proposición es verdad esto implica que

$$a^2 = b^2 = 1, \qquad ab = 0$$

!

Sin embargo esto es **IMPOSIBLE**.

Seminario de Estudiantes
F C F M

Ecuación de Dirac

Segundo intento: Ecuación de Dirac

Dirac tuvo una solución brillante, que tal si

$$ab \neq ba$$

Por lo que,

$$(ax + by)(ax + by) = a^2x^2 + b^2y^2 + (ab + ba)xy$$

Esto implica que

$$a^2 = b^2 = 1, \qquad ab + ba = 0$$

¿Es posible que dos números *a* y *b* cumplan lo anterior?

Respuesta corta: No, pero ¿y si no son números?

Seminario de Estudiantes
F C F M

Ecuación de Dirac

Segundo intento: Ecuación de Dirac

Dirac encontró que es posible si *a* y *b* son **MATRICES.** Por ejemplo en dos dimensiones las matrices que cumplen esto son:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \; \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \; \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

que son conocidas como *matrices de Pauli.*

Este resultado es de bastante utilidad para encontrar una ecuación cuántica relativista. Y se debe a lo siguiente

$$E = \sqrt{(pc)^2 + (mc^2)^2} \quad \Rightarrow \quad E = apc + bmc^2$$

Así, al sustituir en la Ec. de Schrödinger no quedan raíces feas y raras.

Seminario de Estudiantes FCFM

Ecuación de Dirac

Segundo intento: Ecuación de Dirac

Tendremos una ecuación consistente. Así, Dirac encontró la siguiente ecuación:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r})}{\partial t} = \left[\boldsymbol{a}\cdot\nabla + bmc^2\right]\psi(\boldsymbol{r})$$

conocida como la **ECUACIÓN DE DIRAC**. Y donde podemos identificar

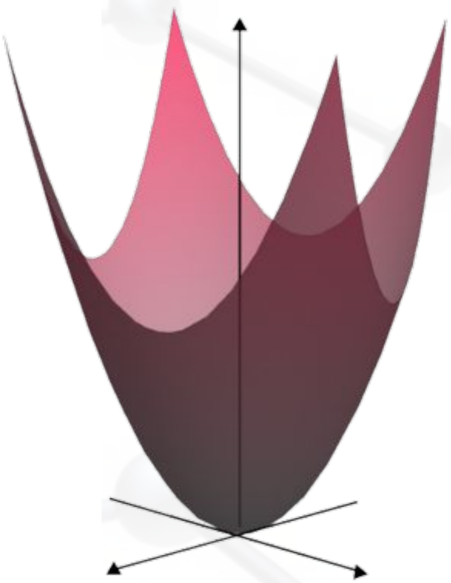
$$H = \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \beta mc^2$$

conocido como Hamiltoniano de Dirac. Sus soluciones también resultan en energías negativas, que luego Dirac interpretó como la **anti-materia.**

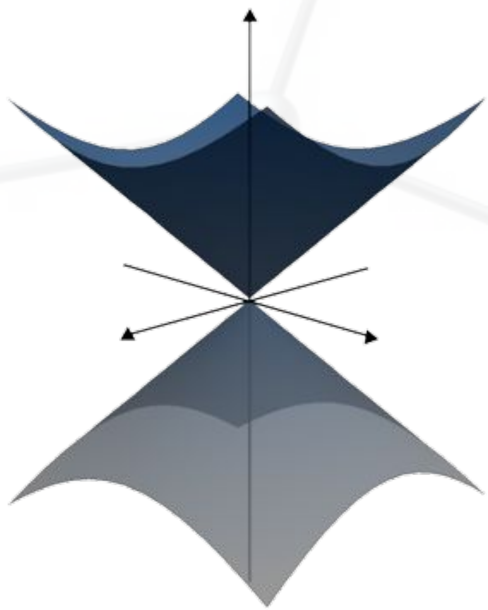
Ecuación de Dirac

Diferencias con Schrödinger

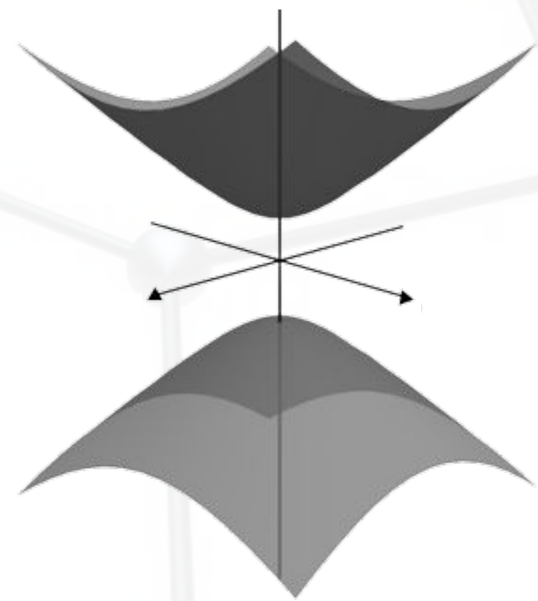
La solución a la ecuación de Dirac difiere en algunos aspectos a la de Schrödinger. Si graficamos la energía tendremos



Schrödinger (parabólica)



Sin masa

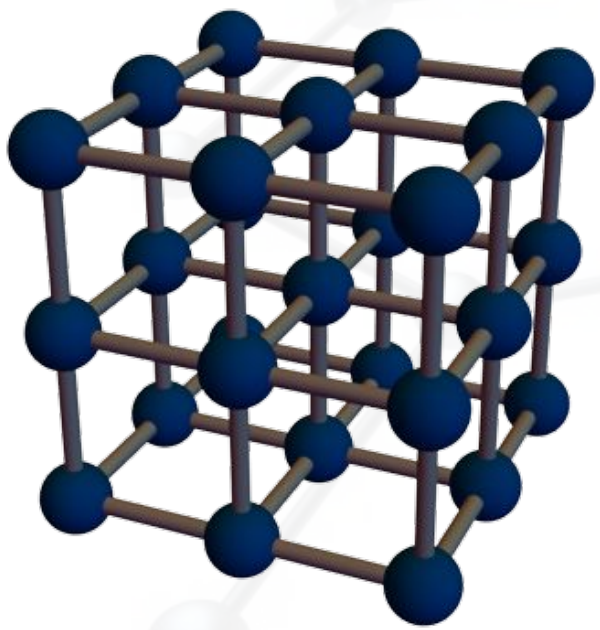


Con masa

Dirac (cónica)

Seminario de Estudiantes
F C F M

Electrones en un cristal



Cristal 3D

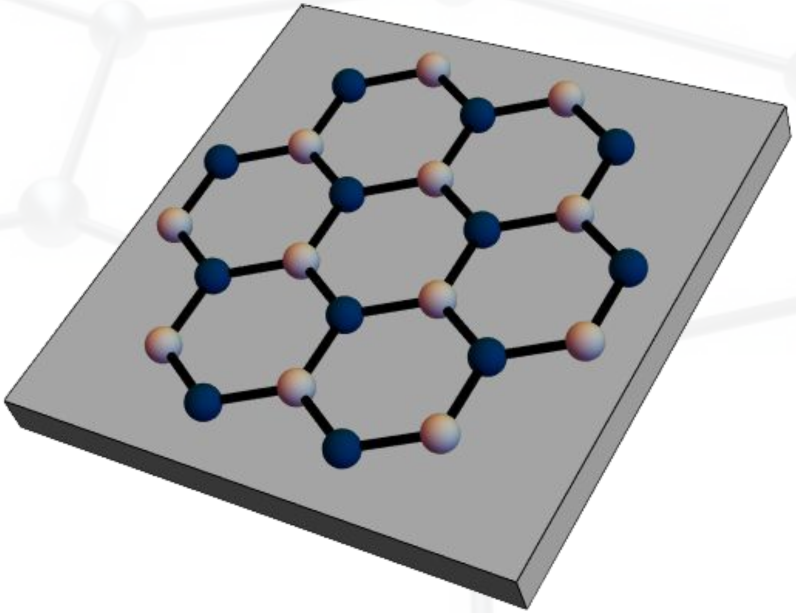
Para estudiar los sólidos se utiliza la ecuación de Schrödinger. En base al *ansatz* de Bloch, llegamos a una clasificación:

Aislante Semiconductor Conductor

Estructura de bandas

Seminario de Estudiantes
F C F M

Descubrimiento de materiales 2D: Grafeno



Fuente: https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2010/summary/

Premio Nobel en Física 2010

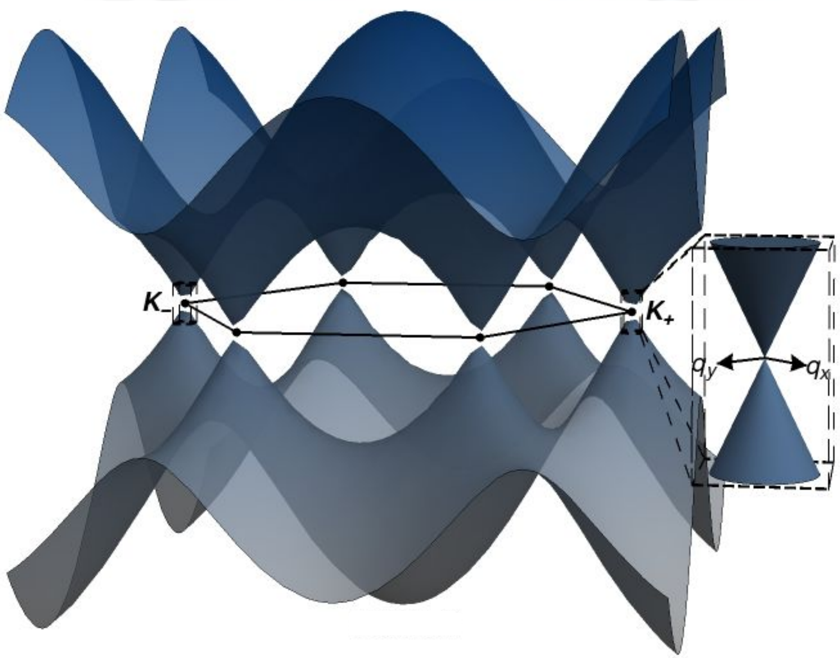
Andre Geim & Konstantin Novoselov

"Por experimentos innovadores sobre el material bidimensional grafeno".

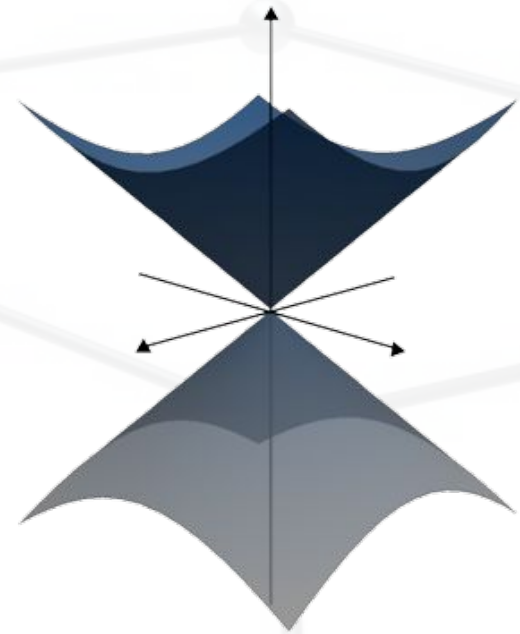
Novoselov, K. S., et al. (2005). *Science, 306*(5696), 666-669.

Seminario de Estudiantes
F C F M

Electrones ultrarelativistas en grafeno



Estructura de bandas



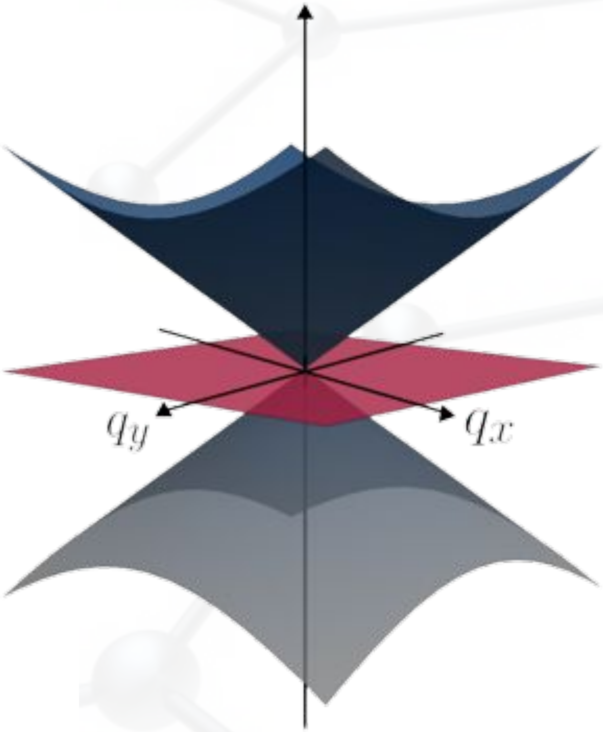
Conos de Dirac

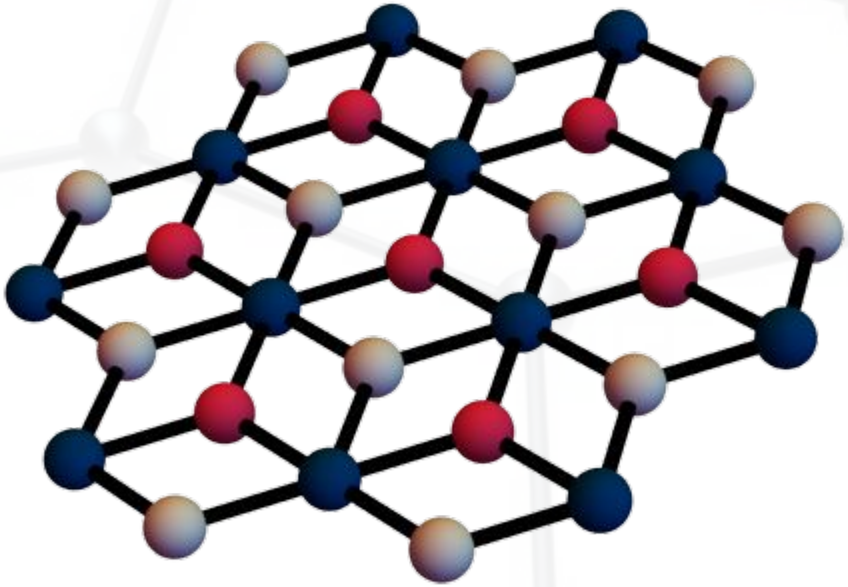
Hamiltoniano de Dirac: $\mathcal{H}(\boldsymbol{q}) = \hbar v_F (\tau_z \otimes \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{\sigma})$

- Novoselov, K. S., et al. (2005). *Nature*, *438*(7065), 197-200.
- Neto, A. C., et al. (2009). *Rev. Mod. Phy.*, 81(1), 109.

Seminario de Estudiantes
F C F M

Modelo α-T$_3$ o red de dados



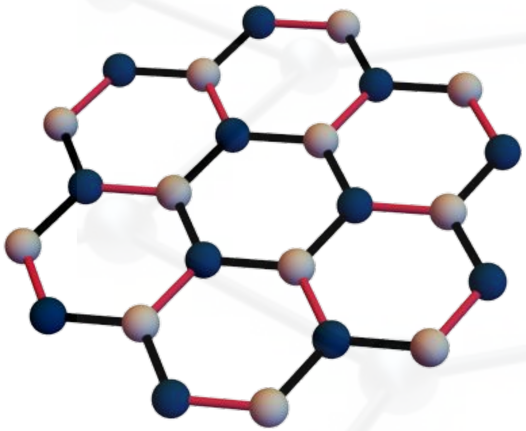


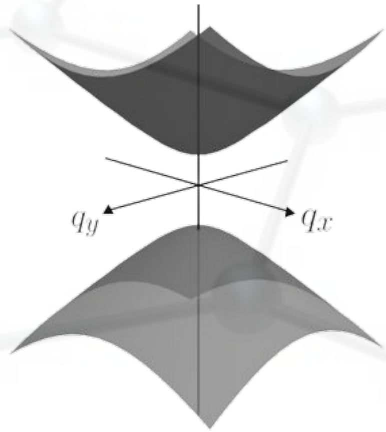
En el modelo α-T$_3$ se añade un átomo en el centro de cada hexágono a la red de grafeno. Esto repercute en las propiedades electrónicas.

Raoux, A., et al. (2014). *Phy. Rev. Lett.*, *112*(2), 026402.

Seminario de Estudiantes
F C F M

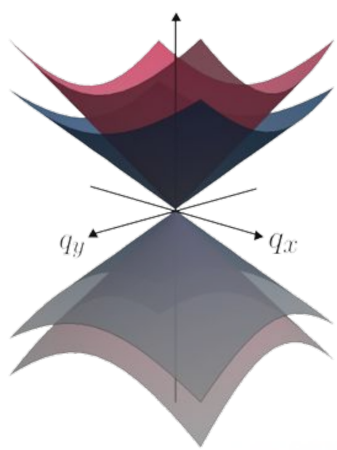
Grafeno con distorsión Kekulé

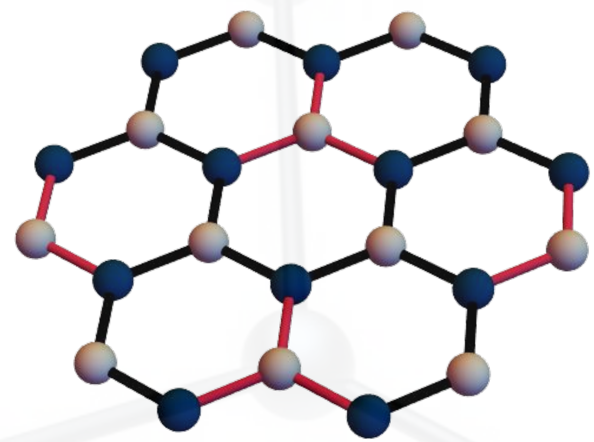




Grafeno con distorsión O (Kek-O)

Grafeno con distorsión Y (Kek-Y)





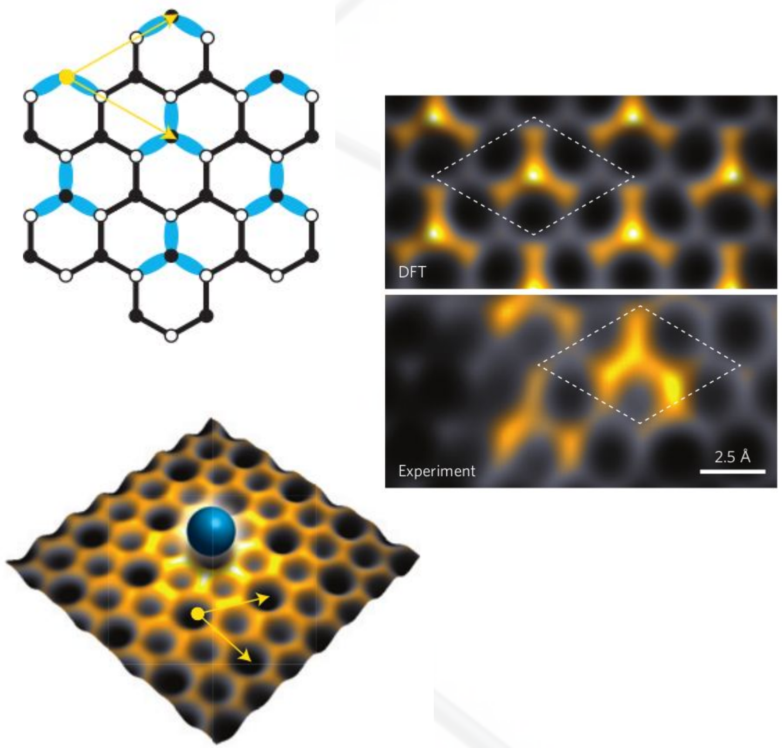
- Chamon, C. (2000). *Physical Review B*, *62*(4), 2806.
- Gamayun, O. V., et al. (2018). *New Journal of Physics*, *20*(2), 023016.

Seminario de Estudiantes
F C F M

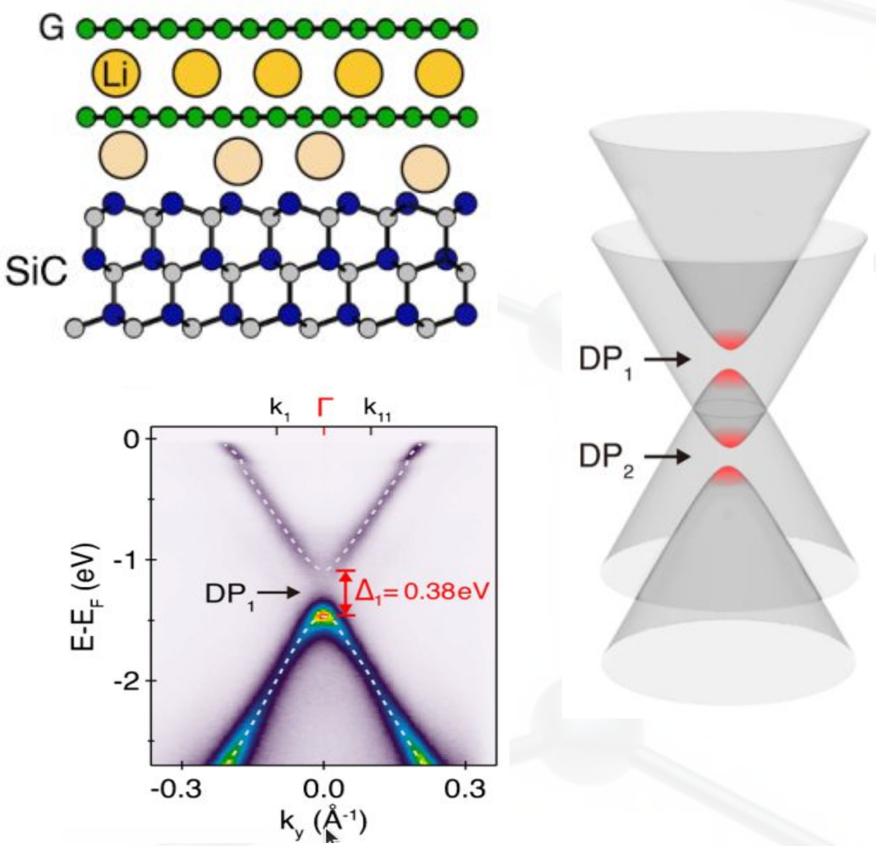
Grafeno con distorsión Kekulé

Evidencia experimental

Kek-Y



Kek-O

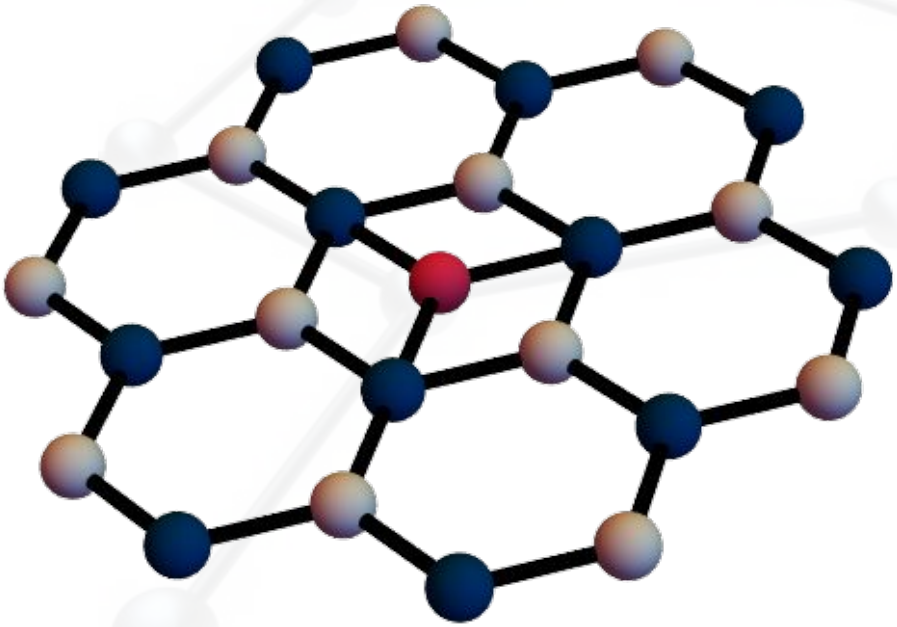


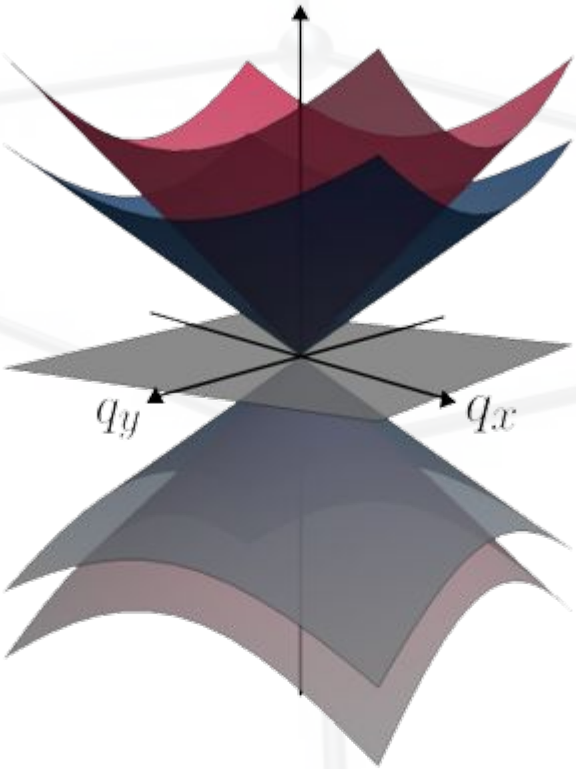
Gutiérrez, C., et al. (2016). *Nat. Phy.*, *12*(10), 950-958.

Bao, C., et al. (2021). *Phy. Rev. Lett.*, *126*(20), 206804.

Seminario de Estudiantes
F C F M

Modelo α-T_3 con periodicidad Kekulé





En el modelo α-T_3 con periodicidad Kekulé se añade un átomo en el centro de cada hexágono pero esta vez con cierta periodicidad.

Luis E. Sánchez, R. Carrillo-Bastos. (2022). Kekulé-modulated α-T3 model. (Unpublished)

Seminario de Estudiantes
F C F M

Aplicaciones y conclusiones

Los materiales o sistemas de Dirac, comparten características universales, tales como **alta capacidad calorífica, conductividad óptica, y susceptibilidad magnética**, por mencionar algunas. Esto los convierte en buenos candidatos para la próxima generación de dispositivos electrónicos.

Finalmente, cabe mencionar que el grafeno y otros materiales similares son un puente entre la *Física de la Materia Condensada y la Física de Altas Energías.* Así, el estudio profundo de las propiedades de estos materiales no solo es importante para su aplicación en tecnología, sino que también permite una mejor comprensión de los fenómenos físicos en sistemas complejos.

Seminario de Estudiantes
FCFM

¡Muchas gracias!

luis-sanchez@uadec.edu.mx