



Materiales de Dirac: Un vistazo al futuro

C. Abdiel de Jesús Espinosa Champo

Facultad de Ciencias en Física y Matemáticas Universidad Autónoma de Chiapas

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas; a 14 de marzo de 2019

C. Abdiel Espinosa Ch. (FCFM-UNACH)

Materiales de Dirac

Tuxtla Gtz., Chis. 06/03/19

< ∃⇒

Índice

1 Introducción

- Ecuación de Dirac
- Materiales de Dirac
- 2 Grafeno
 - Historia

- Propiedades
- Aplicaciones
- 3 Straintrónica y optotrónica
 - Straintrónica en grafeno
- 4 Conclusiones

Tuxtla Gtz., Chis. 06/03/19 2/52

3

<ロト < 同ト < ヨト < ヨト

Outline

1 Introducción

Ecuación de Dirac

- Materiales de Dirac
- 2 Grafeno
 - Historia

Propiedades
Aplicaciones
Straintrónica y optotrónica
Straintrónica en grafeno
4 Conclusiones

3

<ロト < 同ト < ヨト < ヨト

Reseña historica

A principios del siglo pasado aparecieron dos de las teorías físicas que cambiaron nuestra forma de comprender la naturaleza: la RG a grandes escalas y la mecánica cuántica a pequeñas escalas. Las ecuaciones que rigen a cada una de ellas son:

$$G_{\mu\nu} = rac{8\pi G}{c^4} T_{\mu\nu}$$
 (Ecuación de Einstein) (1)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(r,t) + V(r)$$
 (Ec. de Schrödinger) (2)

C. Abdiel Espinosa Ch. (FCFM-UNACH)

<ロト <部ト < 国ト < 国ト - 国

Reseña historica

A principios del siglo pasado aparecieron dos de las teorías físicas que cambiaron nuestra forma de comprender la naturaleza: la RG a grandes escalas y la mecánica cuántica a pequeñas escalas. Las ecuaciones que rigen a cada una de ellas son:

$$G_{\mu\nu} = rac{8\pi G}{c^4} T_{\mu\nu}$$
 (Ecuación de Einstein) (1)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(r,t) + V(r)$$
 (Ec. de Schrödinger) (2)

¿Qué pasa con las partículas cuánticas relativistas?

イロト 不得 トイヨト イヨト 二日

Actualmente



Versión resumida



Figura 1: "Lagrangiano del modelo estándar"

C. Abdiel Espinosa Ch. (FCFM-UNACH)

Materiales de Dirac

Tuxtla Gtz., Chis. 06/03/19

ヨト ・ヨト

6 / 52

- 3

1^{er} intento: Klein-Gordon

En 1926, Oskar Klein y Walter Gordon propusieron la ecuación

$$\left[\Box + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right]\Psi(r,t) = 0 \tag{3}$$

donde

$$\Box \equiv \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2$$

que es invariante bajo las transformaciones de Lorentz, cumpliendo la relación $E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$; no obstante Ψ no puede ser interpretada en relación a una densidad de probabilidad como en la Ec. de Schrödinger.

2° intento: Dirac

En 1928, Paul Dirac formuló una ecuación que describe las partículas elementales de espín $\frac{1}{2}$, como el electrón y es completamente consistente con los principios de la mecánica cuántica y de la teoría de la relatividad especial.

$$(i\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu}-mc)\psi=0 \tag{4}$$

donde las γ^{μ} satisfacen las relaciones $\{\gamma^{\mu},\gamma^{\nu}\}=2\eta^{\mu\nu}\mathbb{1}.$

Si consideramos la energía

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \tag{5}$$

en el regimen ultra-relativista $cp \gg mc^2$, la energía llega a ser líneal, y con la elección apropiada de las matrices γ^{μ} , la ecuación de Dirac se desacopla en dos ecuaciones que pueden ser descritos como

$$i\hbar\partial_0\psi_{R/L} = \pm c(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\hat{\rho}})\psi_{R/L}$$
 (6)

donde $\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla$, σ es el vector de matrices de Pauli, y $\psi_{R/L}$ son espinores con dos componentes. El Hamiltoniano,

$$\mathscr{H} = \pm c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{\rho}}) \tag{7}$$

es conocido como el Hamiltoniano de Weyl, y los espinores asociados como los espinores de Weyl.

C. Abdiel Espinosa Ch. (FCFM-UNACH)	Materiales de Dirac	Tuxtla Gtz	., Chis.	06/03/19	9 / 52
	4		• • = •	지 문 제 문	*) Q (-



Figura 2: Espectro para una partícula libre.

C Abdiel Essiness Ch. (ECEM UNIACH) Med	toriales de Dires	C+- ("hia	06 /02 /10	10 / F
				1 = 1 = 1	-)40

Entonces, ¿los modelos relativistas de Dirac y Weyl tienen un poco que ver con lo que sucede con los electrones en un sólido?

C. Abdiel Espinosa Ch.	(FCFM-UNACH)	Materiales de Dirac	Tuxtla Gtz.,	Chis.	06/03/19)	11 / 52
		4		< ₹ >	< ₹ >	₹.,	*) Q (*

Entonces, ¿los modelos relativistas de Dirac y Weyl tienen un poco que ver con lo que sucede con los electrones en un sólido?

La respuesta es **no siempre**; esto es porque los sólidos presentan un entorno complejo donde los electrones interactúan con los núcleos y entre sí, y estas interacciones modifican efectivamente las propiedades electrónicas.

Consideremos dos átomos A y B; y los estados $\psi_A \pm \psi_B$



C. Abdiel Espinosa Ch.	(FCFM-UNACH)	Materiales de Dirac	Tuxtla Gtz.	Chis.	06/03/19)	12 / 52
				<≣>	< 重 >	₹.	うくで



Abdiel Ferlinses Ch		Matavialas da Divas	Turnella Cha	Ch:-	06 /02 /10	-	12 / 52
Abdiel Espinosa Cn.	(FCFM-UNACH)	iviateriales de Dirac	Tuxtia Gtz.,	Chis.	00/03/19	1	13/32

С

4 A

H N

1. 1. 1.





Figura 3: a) 5 átomos b) gran número de átomos.

э





Figura 4: a)semiconductor b)semimetal c) metal.

C. Abdiel Espinosa Ch.	(FCFM-UNACH)	Materiales de Dirac	Tuxtla	Gtz.,	Chis.	06/03/19		15 / 52
					$\gamma = r$	1 E 1	-	-)40

Materiales de Dirac/Weyl

Son materiales sólidos cristalinos cuya estructura de bandas cerca de la energía de Fermi tienen relación de dispersión igual a las obtenidas a partir de la ecuación de Dirac, además, el Hamiltoniano utilizado para describir a los grados de libertad electrónicos es similar al Hamiltoniano Dirac-Weyl.

Materiales de Dirac/Weyl

Son materiales sólidos cristalinos cuya estructura de bandas cerca de la energía de Fermi tienen relación de dispersión igual a las obtenidas a partir de la ecuación de Dirac, además, el Hamiltoniano utilizado para describir a los grados de libertad electrónicos es similar al Hamiltoniano Dirac-Weyl.



-

-

Material	Pseudo-spin	Energy scale
Graphene, silicene, germanene	Sublattice	$1 - 3 \mathrm{eV}$
Artificial graphenes	Sublattice	$10^{-8} - 0.1 \mathrm{eV}$
Hexagonal layered heterostructures	Emergent	$0.01 - 0.1 \mathrm{eV}$
Hofstadter butterfly systems	Emergent	0.01 eV
Graphene-hBN heterostructures in high magnetic fields	-	
Band inversion interfaces: SnTe/PbTe, CdTe/HgTe, PbTe	Spin-orbit ang. mom.	0.3 eV
2D topological insulators: HgTe/CdTe, InAs/GaSb, Bi bilayer,	Spin–orbit ang. mom.	<0.1 eV
3D topological insulators: $Bi_{1-x}Sb_x$, Bi_2Se_3 , strained HgTe, Heusler alloys,	Spin-orbit ang. mom.	$\lesssim 0.3 \mathrm{eV}$
Topological crystalline insulators: SnTe, $Pb_{1-x}Sn_xSe$	Orbital	$\lesssim 0.3 \text{eV}$
<i>d</i> -wave cuprate superconductors	Nambu pseudo-spin	$\leq 0.05 \mathrm{eV}$
³ He	Nambu pseudo-spin	0.3 µeV
3D Weyl and Dirac SM	Energy bands	Unclear
Cd ₃ As ₂ , Na ₃ Bi		

Figura 5: Materiales de Dirac hasta 2014. [T. O. Wehling et al. Dirac Materials, Advances in Physics 63 (1), 2014.]

C. Abdiel Espinosa Ch. (FCFM-UNACH)

- -

Materiales de Dirac

Tuxtla Gtz., Chis. 06/03/19

イロト イポト イヨト イヨト 三日





Figura 6: a) Vista lateral de siliceno b) Vista frontal de borofeno

э

<ロト < 同ト < ヨト < ヨト

Outline

1 Introducción

Ecuación de Dirac

- Materiales de Dirac
- 2 Grafeno
 - Historia

- Propiedades Aplicaciones
- **3** Straintrónica y optotrónica
 - Straintrónica en grafeno
- 4 Conclusiones

Tuxtla Gtz., Chis. 06/03/19

< ロ > < 同 > < 回 > < 回 >

э

¿Qué es el grafeno?

El grafeno, fue el primer material verdaderamente bidimensional (2D) y cristalino sintetizado por el hombre en el año 2004 [K. Novoselov et al. Science 306(5696), 2004].



Figura 7: 1 a) Crecimiento de grafeno prístino sobre Cu(111). Imagen STM, $V_{bias} = +0.8$ Volts, I = 0.8 nA, T = 80 K. b) Imagen STM estereográfica de una capa de grafeno sobre Cu(111). I = 0.8 nA, $V_{bias} = 0.8$ Volts, T = 80 K. Rango de $Z \sim 0.06$ nm. [George W. Flynn. The Journal of Chemical Physics 135(5), 2011].

C. Abdiel Espinosa Ch. (FCFM-UNACH)

Materiales de Dirac

< □ ▶ < □ ▶ < □ ▶ < □ ▶ < □ ▶
 Tuxtla Gtz., Chis. 06/03/19



«For groundbreaking experiments regarding the two-dimensional material graphene»

C. Abdiel Espinosa Ch. (FCFM-UNACH)

Materiales de Dirac

Tuxtla Gtz., Chis. 06/03/19

Ignobel 2000



Figura 8: Por hacer flotar a una rana en un campo electromagnético de \sim 16 T.

◆ロ ト ◆ □ ト ◆ □ ト ◆ □ ト ◆ □ ト ◆ □ ト ◆ □ ト ◆ □ ト ◆ □ ト ◆ □ ト ○ ○ ○ Tuxtla Gtz., Chis. 06/03/19 22/52

¿De dónde y cómo se obtiene el grafeno?

- La palabra grafeno hace referencia a una monocapa de carbono del grafito.
- Estas monocapas pueden ser sintetizadas mediante la técnica conocida como exfoliación micromecánica.



Figura 9: 2 a) Grafito. b)Método de exfoliación micromecánica.

Propiedades mecánicas

[Tim J. Booth et al. Nano Letters 8(8), 2008.].

- Se utilizó la técnica de Microscopía de Fuerza Atómica para realizar esfuerzos sobre grafeno.
- Se encontró que es 300 veces más fuerte que el acero.
- Es elástico hasta un 23%
- La tensión de ruptura excede 1 TPa.

▲ □ ▶ ▲ □ ▶ ▲ □ ▶

Propiedades mecánicas

[Tim J. Booth et al. Nano Letters 8(8), 2008.].

- Se utilizó la técnica de Microscopía de Fuerza Atómica para realizar esfuerzos sobre grafeno.
- Se encontró que es 300 veces más fuerte que el acero.
- Es elástico hasta un 23%
- La tensión de ruptura excede 1 TPa.



Propiedades electrónicas y térmicas [Neil Savage. Nature, 483 (2012).]



Figura 10: Propiedades térmicas y eléctricas comparadas con otros materiales .

Materiales de Dirac

Tuxtla Gtz., Chis. 06/03/19

Grafeno Propiedades

La relación de dispersión del grafeno es lineal a bajas energías y forma un cono (Cono de Dirac) alrededor del punto que coincide con el nivel de Fermi del grafeno e implica que los electrones en grafeno se comportan como <u>fermiones de Dirac sin masa</u> que se mueven a la velocidad de Fermi. [K. S. Novoselov et al. Nature 438, 2005.].



Circuitos integrados [Inanc Meric et al. Nature Nanotechnology 3(2008).]

- El grafeno tiene alta movilidad de portadores de carga, con poco ruido, lo cual lo hace adecuado para ser usado en la fabricación de trnasistores.
- Circuitos integrados basados en grafeno manejan frecuencias arriba de los 10 GHz.
- Transistores impresos en plásticos flexibles que pueden operar a 25 GHz.



Membranas impermeables

Impermeable Atomic Membranes from **Graphene Sheets**



J. Scott Bunch, Scott S. Verbridge, Jonathan S. Alden, Arend M. van der Zande, Jeevak M. Parpia, Harold G. Craighead, and Paul L. McEuen*

Cornell Center for Materials Research, Cornell University, Ithaca, New York 14853

Received May 21, 2008: Revised Manuscript Received June 12, 2008

ABSTRACT

We demonstrate that a monolayer graphene membrane is impermeable to standard gases including helium. By applying a pressure difference across the membrane, we measure both the elastic constants and the mass of a single layer of graphene. This pressurized graphene membrane is the world's thinnest balloon and provides a unique separation barrier between 2 distinct regions that is only one atom thick.

Membranes are fundamental components of a wide variety of physical, chemical, and biological systems, used in everything from cellular compartmentalization to mechanical pressure sensing. They divide space into two regions, each capable of possessing different physical or chemical properties. A simple example is the stretched surface of a balloon, where a pressure difference across the balloon is balanced by the surface tension in the membrane. Graphene, a single layer of graphite, is the ultimate limit: a chemically stable and electrically conducting membrane one atom in thickness.1-3 An interesting question is whether such an atomic membrane can be impermeable to atoms, molecules and ions. In this letter, we address this question for gases. We show that these membranes are impermeable and can support pressure differences larger than one atmosphere. We use such ---- Alaboration in and also according to a construction

used to confirm that this graphene sheet was a single laver in thickness.4-6 Chambers with graphene thickness from 1 to ~75 layers were studied

After initial fabrication, the pressure inside the microchamber, pin, is atmospheric pressure (101 kPa). If the pressure external to the chamber, pest, is changed, we found that piu will equilibrate to pea on a time scale that ranges from minutes to days, depending on the gas species and the temperature. On shorter time scales than this equilibration time, a significant pressure difference $\Delta p = p_{at} - p_{ext}$ can exist across the membrane, causing it to stretch like the surface of a balloon (Figure 1b). Examples are shown for $\Delta p \ge 0$ in Figure 1c and $\Delta p \le 0$ in Figure 1d.

To create a positive pressure difference, $\Delta p \ge 0$, as shown

Figura 12: El grafeno es una membrana impermeable a gases estándares, incluyendo el Helio. J. Scott Bunch et al. Impermeble Atomic Membranes from Graphene Sheets. Nano イロト イポト イヨト イヨ Lett. 8(8):2458-2462 (2008). 28 / 52

C. Abdiel Espinosa Ch. (FCFM-UNACH)

Materiales de Dirac

Tuxtla Gtz., Chis. 06/03/19



C. Abdiel Espinosa Ch. (FCFM-UNACH)

Materiales de Dirac

Tuxtla Gtz., Chis.

Chis. 06/03/19

Nanomedicina





pubs.acs.org/CR

Graphene: Promises, Facts, Opportunities, and Challenges in Nanomedicine

Hong Ying Mao,[†] Sophie Laurent,[‡] Wei Chen,^{#,↑,§} Omid Akhavan,^{#,||} Mohammad Imani,[⊥] Ali Akbar Ashkarran,[⊗] and Morteza Mahmoudi^{*,⊙, ♥,}♠

¹Depatrant of Chemistry, National University of Singapore, 3 Science Drive 3, Singapore 117543, Singapore ¹Depatrant of General, Organic, and Biomedical Chemistry, NNR and Molecular Imaging Laboratory, University of Mons, Avenue Mastriau, 19, B-7000 Mons, Belgium ¹Depatrant of Physics, Sharif University of Technology, P.O. Box 111555/9161, Tehran, Iran ¹Movel Drug Delivery Systems Depatrment, Iran Polymer and Petrochemical Institute, Tehran, Iran ¹Novel Drug Delivery Systems Depatrment, Iran Polymer and Petrochemical Institute, Tehran, Iran ¹Natottened Physics, Readly of Basic Sciences, University of Mazandana, Babolaar, Iran ¹Nanotechnology Research Center, Faculty of Pharmacy, Tehran University of Medical Sciences, Tehran, Iran ¹Nanotechnology Research Center, Faculty of Pharmacy, Tehran University of Medical Sciences, Tehran, Iran ¹Nanotechnology Research Center, Faculty of Pharmacy, Tehran University of Medical Sciences, Tehran, Iran ¹Nanotechnology Research Center, Faculty of Pharmacy, Tehran University of Medical Sciences, Tehran, Iran ¹Nanotechnology Research Center, Faculty of Pharmacy, Tehran University of Medical Sciences, Tehran, Iran ¹Nanotechnology Research Center, Faculty of Pharmacy, Tehran University of Medical Sciences, Tehran, Iran ¹Nanotechnology Research Center, Faculty of Pharmacy, Tehran University of Medical Sciences, Tehran, Iran ¹Nanotechnology Research Center, Faculty of Pharmacy, Tehran University of Medical Sciences, Tehran, Iran ¹Nanotechnology Research Center, Faculty of Pharmacy, Tehran University of Medical Sciences, Tehran, Iran ¹Nanotechnology Research Center, Faculty of Pharmacy, Tehran University of Medical Sciences, Tehran, Iran ¹Nanotechnology Research Center, Faculty of Pharmacy, Tehran University of Medical Sciences, Tehran, Iran ¹Nanotechnology Research Center, Faculty of Pharmacy, Tehran University of Medical Sciences, Tehran, Iran ¹Nanotechnology Research Center, Faculty of Pharmacy, Tehran University of Medical



Notes	3417
Biographies	3417
Acknowledgments	3419
Abbreviations	3419
References	3419

1. INTRODUCTION

Graphene, a two-dimensional (2D) sheet of sp²-hybridized carbon atoms packed into a honeycomb lattice, has led to an

Figura 13: El grafeno es una material que promete mucho en cuanto a las aplicaciones a nanomedicina. Hong Ying Mao et al. Graphene: Promises, Facts, Opportunities, and challenges in Nanomedicine. Chemical Review 113:3407-3424 (2013).

C. Abdiel Espinosa Ch. (FCFM-UNACH)

Materiales de Dirac

Tuxtla Gtz., Chis. 06/03/19

Image: A image: A

Nanomedicina

CONTENTS

1. Introduction	3407
2. Synthesis of Graphene and Graphene Oxide	3408
2.1. Mechanical Exfoliation	3408
2.2. Epitaxial Growth	3408
2.3. Unzipping Carbon Nanotubes	3409
2.4. Exfoliation of Graphite Oxide	3409
2.5. Liquid Phase Exfoliation of Graphite	3409
2.6. Other Methods to Produce Graphene and	
Graphene Oxide	3409
3. Protein–Graphene Interactions	3410
4. Toxicity Evaluations of Graphene and Its De-	
rivatives	3411
4.1. Bacterial Toxicity	3411
4.2. Cellular Toxicity	3411
4.3. Graphene and Graphene Derivatives Tox-	
icity to Simple Animals	3413
5. Biomedical Application of Graphenes	3413
5.1. Graphenes Application for Drug Delivery	3413
5.2. Graphenes for Biosensing	3414
5.3. Graphenes for Biomedical Imaging	3415
5.4. Graphenes for Stem Cell Technology	3415
5.5. Graphenes for Photothermal Therapy	3416
6. Conclusion and Future Perspectives	3417
Author Information	3417
Corresponding Author	3417
Present Address	3417



Figure 2. Distribution of different biomedical applications of graphene.

Figura 14: Hay mucha investigación en cuanto a aplicaciones del grafeno en nanomedicina, tales como: material antibacteial, biosensores, tratamiento de cáncer.

En 2010, la Academia China de Ciencias encontró que hojuelas de oxido de grafeno son altamente efectivas para matar bacterias tales como la Escherichia Coli.



C. Abdiel Espinosa Ch. (FCFM-UNACH)

Materiales de Dirac

Tuxtla Gtz., Chis. 06/03/19

Aplicaciones

C. Abdiel Espinosa Ch. ((FCFM-UNACH)	Materiales de Dirac	Tuxtla Gt	z., Chis.	06/03/1	9	33 / 52
				▶ • ≣	I → E →	æ	500

Outline

1 Introducción

- Ecuación de Dirac
- Materiales de Dirac
- 2 Grafeno
 - Historia

	Propiedades
	 Aplicaciones
3	Straintrónica y optotrónica
	Straintrónica en grafeno
4	Conclusiones

Tuxtla Gtz., Chis. 06/03/19

3

Consideremos una nanobanda con terminación armchair (AGN) unida a dos conductores metálicos como se indica en la figura. Y aplicamos un campo de deformación, $\mathbf{u}(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) \approx (u(\mathbf{x}_i), 0)$ a lo largo de la dirección armchair. Supondremos que los conductores metálicos no se ven afectados por dicho campo.



Figura 16: Representación esquemática de un AGN conectado a electrodos en las interfases L (izquierda) y R (derecha).

Materiales de Dirac

Tuxtla Gtz., Chis. 06/03/19

Modelo

La ecuación de Schrödinger que debe ser resuelta $\hat{H}\Psi(E) = E\Psi(E)$, donde \hat{H} es el Hamiltoniano de amarre fuerte a primeros vecinos definido por:

$$\hat{H} = -\sum_{\mathbf{r}_{i,j}} t_{\mathbf{r}_{i,j}'+\delta_{i,n}'} c_{\mathbf{r}_{i,j}'}^{\dagger} c_{\mathbf{r}_{i,j}'+\delta_{i,n}'} + \varepsilon_0 \sum_{\mathbf{r}_{i,j}'} c_{\mathbf{r}_{i,j}'}^{\dagger} c_{\mathbf{r}_{i,j}'}$$
(8)

y $\Psi(E)$ es la función de onda del sistema para una energía E dada. En el formalismo de Landauer-Büttiker la función de onda del sistema puede ser representado como $\Psi(E) = \sum_{\mathbf{r}'_{i,j}} \alpha_{i,j} | \psi_{i,j} \rangle$ donde los coeficientes complejos $\alpha_{i,j}$ pueden ser determinados usando el método de matrices de transferencia.

Matriz de transferencia



C. Abdiel Espinosa Ch.	(FCFM-UNACH)	Materiales de Dirac	Tuxtla (Gtz.,	Chis.	06/03/1	19	37 / 52
					1 = 1	$\gamma = \gamma$	-	-)40

Matriz de transferencia



Reescribiendo la ecuación de Schrödinger podemos obtener la ecuación:

$$-\sum_{\tau,\gamma} t_{\mathbf{r}'_{i,j}+\delta'_{i,n}} \alpha_{i+\tau,j+\delta} = (E-\varepsilon_0)\alpha_{i,j}, \tag{9}$$

donde τ and γ especifican los sitios de los primeros vecinos de $\mathbf{r}'_{i,j}$. El siguiente paso es expresar los M coeficientes $\alpha_{i,j}$ para un i dado como un vector $\vec{\alpha}_i$.

C. Abdiel Espinosa Ch.	(FCFM-UNACH)	Materiales de Dirac	Tuxtla	Gtz.,	Chis.	06/03/1	9	38 / 52
		4		□P ►	1 = 1	1 = 1	-	*) 4 (*

Reescribiendo la ecuación de Schrödinger podemos obtener la ecuación:

$$-\sum_{\tau,\gamma} t_{\mathbf{r}'_{i,j}+\delta'_{i,n}} \alpha_{i+\tau,j+\delta} = (E-\varepsilon_0)\alpha_{i,j}, \qquad (9)$$

donde τ and γ especifican los sitios de los primeros vecinos de $\mathbf{r}'_{i,j}$. El siguiente paso es expresar los M coeficientes $\alpha_{i,j}$ para un i dado como un vector $\vec{\alpha}_i$. Ahora definamos la matriz de transferencia $2M \times 2M$, \hat{P}_i , que conecta $\vec{\alpha}_i$ con las de las columnas vecinas, de tal forma que la matriz total cumple:

$$\begin{pmatrix} \vec{\alpha}_{0}^{L} \\ \\ \vec{\alpha}_{1}^{L} \end{pmatrix} = \hat{P} \begin{pmatrix} \vec{\alpha}_{N}^{R} \\ \\ \\ \\ \vec{\alpha}_{N+1}^{R} \end{pmatrix},$$
(10)

C. Abdiel Espinosa Ch. (FCFM-UNACH)

Materiales de Dirac

Tuxtla Gtz., Chis. 06/03/19

Ahora supongamos que tenemos M ondas viajeras de la derecha y de la izquierda con amplitud unitaria para la energía dada obteniendo que la forma de las funciones de onda en la interface es :

$$\begin{aligned} \alpha_{ij}^{L} &= \sum_{s'} (\delta_{s's} e^{ik_{x}^{s'} x_{i}} + r_{s's} e^{-ik_{x}^{s'} x_{i}}) \sin(k_{y}^{s'} y_{j}) \\ \alpha_{ij}^{R} &= \sum_{s'} t_{s's} e^{ik_{x}^{s'} x_{i}} \sin(k_{y}^{s'} y_{j}), \end{aligned}$$
(11)

donde $r_{s's}$ y $t_{s's}$ son los coeficientess de reflexión y transmisión del s-ésimo al s'-ésimo canal, y $\delta_{s's}$ es la delta de Kronecker. Esto permite reducir el problema a un sistema de dos ecuaciones lineales para cada canal. El conjunto de ecuaciones a resolver es:

$$\begin{pmatrix} -1 & g_s \\ -e^{-ik_x^s} & h_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_{ss} \\ t_{ss} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ e^{ik_x^s} \end{pmatrix}$$
(12)

con

$$\begin{pmatrix} g_s \\ h_s \end{pmatrix} = \prod_{r=0}^{(N/4)+1} \hat{\zeta}_r \begin{pmatrix} e^{iNk_x^s} \\ e^{i(N+1)k_x^s} \end{pmatrix}, \qquad (13)$$
UNACH) Materiales de Dirac Tuxtla Gtz., Chis. 06/03/19 39/52

C. Abdiel Espinosa Ch. (FCFM-UNACH)

Materiales de Dirac

Tuxtla Gtz., Chis. 06/03/19 Obtenemos que la reflectancia, r_{ss} , de nuestro sistema es dado por

$$|r_{ss}| = \left| \frac{1 - (g_s/h_s)e^{ik_x^s}}{1 - (g_s/h_s)e^{-ik_x^s}} \right|$$

Del resultado previo, podemos obtener la conductividad (G) y el factor de Fano (F), en el formalismo de Landauer-Büttiker [?], está dado por:

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{s}^{M} |t_{ss}|^2,$$
 (14)

C. Abdiel Espinosa Ch.	(FCFM-UNACH)	Materiales de Dirac	Tuxtla	Gtz.,	Chis.	06/03/1	9	40 / 52
					1 = 1	1 = 1	-	*) 4 (*



Figura 17: Conductividad de un AGN deformado como función de $E - \varepsilon_0$ para grafeno prístino $\sigma = 0$ (color azul), y con deformación sinusoidal periódica con $\sigma = 5/7$ (color rojo), y $\sigma = (3*89)/(4*144)$ (color verde). Todas las curvas fueron obtenidas para E = 0, $\lambda = 0.04$, M = 1000, $\gamma M = 1000$, γ



Figura 18: Conductividad a bajas energías de un AGN deformado, como función de $E - \varepsilon_0$ para diferentes valores de longitud de onda de deformación (σ). En todos los casos hemos usado E = 0, $\lambda = 0.08$, M = 10000, y N = 1000.

< ∃⇒

Borofeno

Recientemente, existe un intenso interés en la síntesis e investigación de estructuras cristalinas 2D de Boro, conocidas como borofenos. El Boro es un elemento fascinante debido a su complejidad química y estructural, y los nanomateriales a base de boro de varias dimensiones han llamado mucho la atención.



Figura 19: Lattice de borofeno 8-Pmmn

Materiales de Dirac

Tuxtla Gtz., Chis. 06/03/19

< ロ > < 同 > < 回 > < 回 > < 回 > <

Iniciamos con el Hamiltoniano efectivo a bajas energías tipo Dirac

$$\hat{H} = \rho(v_x \hat{P}_x \sigma_x + v_y \hat{P}_y \sigma_y + v_t \hat{P}_y \sigma_0)$$
(15)

cuya relación de dispersión es

$$E_{\lambda,k}^{\rho} = \rho \, \hbar v_t \, k_y + \lambda \, \hbar \sqrt{v_x^2 \, k_x^2 + v_y^2 \, k_y^2} \tag{16}$$

C. Abdiel Espinosa Ch. (FCFM-UNACH)	Materiales de Dirac	Tuxt	la Gtz.	, Chis.	06/03/1	9	44 / 52
					1 = 1	-	+) Q (+



Figura 20: Gráfica de la energía $E(\mathbf{k})$ como función de \mathbf{k} , en la región alrededor de un cono de Dirac.

C. Abdiel Espinosa Ch. (F	CFM-UNACH)	Materiales de Dirac	Tuxtla Gtz.,	Chis.	06/03/19	45 / 52
				$\gamma = \gamma$		

Para borofeno irradiado por un campo electromagnetico perpendicular al plano,

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} v_t \hat{\Pi}_y & v_x \hat{\Pi}_x - i v_y \hat{\Pi}_y \\ v_x \hat{\Pi}_x + i v_y \hat{\Pi}_y & v_t \hat{\Pi}_y \end{pmatrix}$$
(17)

◆□ ▶ ◆□ ▶ ◆□ ▶ ◆□ ▶ ● ● ● ●

donde $\hat{\Pi} = \hat{P} - (e/c)\mathbf{A}$ y **A** el potencial vectorial dado por $\mathbf{A} = \frac{E_0}{\Omega} \cos(Gz - \Omega t)(\cos(\theta), \sin(\theta)).$

C. Abdiel Espinosa Ch.	(FCFM-UNACH)	Materiales de Dirac	Tuxtla Gtz., Chis.	06/03/19	46 / 52

Para campos intenso o longitud de onda larga ($E_0/\hbar\Omega^2 >> 300$) la ecuación para los espinores se transforman en una ecuación de Mathieu

$$\frac{d^2}{d\phi^2}\chi(\phi) + [a - 2q\cos(2\phi)]\chi(\phi) = 0$$
(18)

donde

y

$$q = -\left(\frac{\zeta}{2\hbar\Omega}\right)^2\tag{19}$$

$$a = \left(\frac{\varepsilon}{\hbar\Omega}\right)^2 - 2q \tag{20}$$

オロト オポト オモト オモト

-

	(
. Abdiel Espinosa Ch.	(FCFM-UNACH)	Materiales de Dirac	Tuxtla Gtz.,	Chis.	06/03/19	47 / 52



Figura 21: Diagrama de estabilidad como función de los parámetros adimensionales a y q para las soluciones de Mathieu. Las regiones de estabilidad (región gris) y la de inestabilidad (región blanca) están divididas por las curvas características $a_n(q) y b_n(q)$ (líneas discontinuas).

C. Abdiel Espinosa Ch. (FCFM-UNACH)

Materiales de Dirac

Tuxtla Gtz., Chis. 06/03/19 48/52



Figura 22: Acercamiento del espectro de energía para el caso de longitud de onda larga cerca de $\Upsilon = 0$, i.e. $\varepsilon = 0$. Para un campo fijo ($E_0 = 2 \text{ V/m}$), la figura muestra dos gaps de primer orden para $\theta = 0$ y $\theta = \pi/2$, respectivamente; y dos bandas de energía. Observamos que el tamaño del gap decrece mientras θ aumenta, con $0 \le \theta \le \pi/2$.

C. Abdiel Espinosa Ch. (FCFM-UNACH)

Materiales de Dirac

Tuxtla Gtz., Chis. 06/03/19 49/52

Outline

1 Introducción

- Ecuación de Dirac
- Materiales de Dirac
- 2 Grafeno
 - Historia

- Propiedades
 Aplicaciones
 Straintrónica y optotrónica
 Straintrónica en grafeno
- 4 Conclusiones

3

50 / 52

<ロト < 同ト < ヨト < ヨト

Conclusión

Iniciando con el descubrimiento del grafeno como el primer ejemplo prominente, estos materiales han atraído un tremendo interés por sus notables propiedades fundamentales, así como su gran potencial y viabilidad para aplicaciones, haciendo de los materiales de Dirac los materiales del futuro.

¡Gracias por su atención!

C. Abdiel Espinosa Ch.	(FCFM-UNACH)	Materiales de Dirac	Tuxtla Gtz., Chis.	06/03/19

イロト イポト イヨト イヨト 三日