

PROPIEDADES FÍSICAS DE SUPERREDES DE GRAFENO EN AUSENCIA Y PRESENCIA DE CAMPOS MAGNÉTICOS

UNIDAD EJECUTORA

Departamento de Física Teórica, Facultad de Física, Universidad de la Habana, MES

AUTOR PRINCIPAL

Dr. Melquiades de Dios Leyva

OTROS AUTORES

Lic. Michael. A. Hernández-Bertrán

Lic. Raúl Cuan

Dr. Carlos. A. Duque

Dr. Alvaro L. Morales

OTRA ENTIDAD PARTICIPANTE

Instituto de Física, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia.

AUTOR PARA LA CORRESPONDENCIA

Dr. Melquiades de Dios Leyva

Departamento de Física Teórica, Facultad de Física, Universidad de la Habana, San Lázaro y L, Vedado 10400, Habana, Cuba

Telef: 7838-4316, Ext. 146

e-mail: dedios@fisica.uh.cu

RESUMEN

Antecedentes: Los autores no han recibido Premio alguno de la Academia de Ciencias de Cuba relacionado con el presente trabajo.

Resultados

En este trabajo se presenta un estudio detallado de las propiedades físicas de superredes unidimensionales de grafeno en ausencia y presencia de un campo magnético perpendicular a la mono-capa. En ausencia de dicho campo se estudian las propiedades de la velocidad de grupo, densidad de estados y conductancia de Landauer con dos terminales en superredes periódicas finitas, que son magnitudes de excepcional importancia en el estudio del transporte electrónico en sistemas finitos. Se establecieron propiedades inusuales, no conocidas hasta ahora, para dichas magnitudes, incluyendo el hecho de que la velocidad de grupo puede tomar valores **superluminales, es decir, mayores que la velocidad de la luz en el vacío**. Se demostró, además, que una de las componentes de la velocidad de grupo está directamente relacionada con el coeficiente de transmisión, la densidad de estados y la conductancia de Landauer, que son magnitudes de interés

experimental. En presencia del campo magnético se estudiaron las características más importantes de las sub-bandas magnéticas de Landau, estados estacionarios correspondientes y fortalezas de las transiciones ópticas entre dichas sub-bandas bajo la acción de un campo electromagnético monocromático. Se establecieron, por primera vez, un número importante de propiedades nuevas para esas magnitudes, incluyendo una regla de selección **completamente nueva** e inusual para las transiciones dipolares eléctricas.

COMUNICACIÓN CORTA

Introducción

Las propiedades del grafito, sustancia suave utilizada en 1564 para crear el lápiz, eran poco conocidas en aquella época. Actualmente se sabe que está formado por capas de grafeno unidas por fuerzas débiles de van der Waals. Hasta hace poco se pensó que el grafeno, formado por una capa bidimensional de carbono (ver la Figura 1), jamás podría existir de forma aislada. Este criterio varió completamente cuando un grupo de investigadores de la Universidad de Manchester reportó, en el año 2004, su obtención y algunas de sus propiedades. Este hallazgo despertó inmediatamente el interés de un número importantes de investigadores de diferentes países, comenzando así el estudio de la primera estructura bidimensional real obtenida por el hombre.

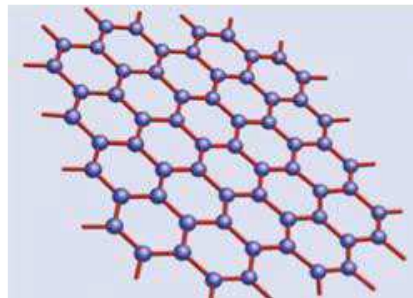


Figura 1. El grafeno está formado por una capa bidimensional de átomos de carbono situados en los vértices del hexágono.

En pocos años fue demostrado que el grafeno posee propiedades físicas que son de extrema importancia para la construcción de dispositivos que pueden revolucionar la tecnología actual de semiconductores. Entre ellas se incluyen: alta fortaleza mecánica; extremadamente altas conductividades eléctrica y térmica; representa una capa conductiva transparente de baja resistencia y alta transmitancia. Debido a esto, entre algunas de sus posibles aplicaciones se encuentran: 1) Uso como pantallas de tacto, muy utilizadas en la telefonía móvil y cajeros automáticos; 2) Papel electrónico, con posible uso en los libros electrónicos futuros; 3) Diodos orgánicos emisores de luz (OLED); 4) Transistores lógicos y de alta frecuencia; 5) Foto-detectores; 6) Componente en dispositivos fotónicos controlables. El grafeno, calificado por muchos como el material del siglo o material maravilla, sirve, además, de puente entre la materia condensada y la física de altas energías. Esto significa, entre otras cosas, que experimentos que debido a su complejidad no se pueden llevar a cabo en la física de altas energías, el grafeno ofrece la posibilidad de hacerlos a bajas energías. Las observaciones anteriores demuestran la importancia de estudiar a profundidad las propiedades de las estructuras basadas en grafeno bajo diferentes condiciones físicas, tales como pozos cuánticos y superredes bajo la acción de campos eléctricos y magnéticos, deformaciones, etc.

El Grupo que dirige el Profesor Melquiades de Dios Leyva ha obtenido, en los últimos dos años, resultados relevantes relacionados con las propiedades del transporte electrónico y

ópticas de superredes de grafeno en ausencia y presencia de campos magnéticos externos, los cuales **han dado lugar a varias publicaciones en revistas internacionales de gran impacto** (ver abajo). Debido a la importancia de esos resultados creemos que cumplen con los requisitos para ser propuestos para Premio de la Academia de Ciencias de Cuba de este año 2017.

Fundamentos Teóricos

Como fue señalado arriba, en este trabajo se estudian las propiedades del transporte electrónico y ópticas de superredes de grafeno en ausencia y presencia de un campo magnético perpendicular a la mono-capa correspondiente. Para ello se parte del hecho de que la dinámica del electrón alrededor del punto de Dirac K en la primera zona de Brillouin es gobernada por el Hamiltoniano de Dirac del fermión de masa cero:

$$\hat{H} = v_F \vec{\sigma} \cdot (\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c} \vec{A}) + V(\vec{r}), \quad (1)$$

siendo v_F la velocidad de Fermi, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ un vector formado con las matrices de Pauli,

$\hat{\vec{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y)$ el operador momento lineal en el plano del grafeno, $\vec{A} = (0, \dots, 0)$ el vector

potencial expresado en la calibración de Landau, $V(\vec{r})$ el potencial periódico unidimensional e I la matriz unidad de 2×2 .

Para este sistema, los estados estacionarios del electrón $\Psi(\vec{r}, t)$ satisfacen el problema característico

$$\{v_F \vec{\sigma} \cdot (\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c} \vec{A}) + V(\vec{r})\} \Psi(\vec{r}, t) = E \Psi(\vec{r}, t), \quad (2)$$

el cual fue resuelto para diferentes situaciones de interés físico:

- 1) En ausencia del campo magnético. En este caso se utilizó al potencial $V(\mathbf{r})$ simétrico y se obtuvieron los estados de Bloch y las bandas correspondientes, donde un elemento fundamental es la aparición de puntos extras de Dirac en el espectro energético.
- 2) En ausencia del potencial periódico $V(\mathbf{r})$. Aquí se obtuvieron los niveles altamente degenerados y no equidistantes de Landau y los espinores de Hermite como sus autofunciones, las cuales sirvieron como base para resolver el problema general mostrado en la ecuación (2).
- 3) El presencia de ambos campos. Para esta situación, se obtuvieron el espectro energético del electrón, el cual está formado por subbandas magnéticas de Landau, y los autoespinores correspondientes.

La ecuación de masa cero de Dirac (2) y sus soluciones fueron los elementos fundamentales que permitieron cumplimentar los objetivos de investigación planteados. Los resultados obtenidos en los dos últimos años han dado lugar a los siguientes **3 artículos**, publicados en revistas internacionales de impacto.

Trabajos publicados sobre el tema en los dos últimos años

1. Group velocity in finite graphene superlattices
M. de Dios-Leyva and R. Cuan
Superlattices and Microstructures **83**, 488 (2015)
2. Graphene superlattices: Effect of finite size on the density of states and conductance
M. A. Hernández-Bertrán, C. A. Duque, and M. de Dios-Leyva
Phys. Status Solidi B, **254**, 1600313 (2017)
3. Exploring graphene superlattices: Magneto-optical properties
C. A. Duque, M. A. Hernández-Bertrán, A. L. Morales, and M. de Dios-Leyva J. Appl. Phys. **121**, 074301 (2017).

NOTA IMPORTANTE: Debido a su importancia, el artículo 1 fue aceptado para publicar dos días después de recibido por la revista. Además, ya ha sido referido por 5 autores. Los dos restantes artículos, publicados hace unos pocos meses, ya han sido solicitados por varios autores.

Descripción de los Resultados Obtenidos

En los dos primeros artículos se reportan los resultados obtenidos en relación con los efectos de tamaño sobre el transporte electrónico en superredes de grafeno en ausencia

del campo magnético. Después de derivar expresiones analíticas para la relación de dispersión, velocidad de grupo y densidad de estados (DOS) en superredes finitas con N periodos, se demostró que los efectos de tamaño pueden modificar sustancialmente las propiedades de dichas magnitudes, especialmente aquellas relacionadas con la estructura de banda, tal como los puntos de Dirac. Se demostró, en particular, que una de las componentes de la velocidad de grupo está directamente relacionada con el coeficiente de transmisión, la DOS y la mconductancia de Landauer, que son magnitudes de interés experimental. **Se demostró, además, que dicha componente puede tomar valores superluminares, es decir, mayores que la velocidad de la luz en el vacío.**

En el tercer artículo se reportan los resultados obtenidos en relación con las propiedades de las subbandas magnéticas de Landau, autoespinores correspondientes y fortalezas de las transiciones ópticas entre esas subbandas para superredes de grafeno en presencia de un campo magnético perpendicular a la mono-capa. Se demostró que esas magnitudes exhiben propiedades inusuales, cuyas características dependen del régimen de campo magnético considerado. Fue encontrado que para campos intermedios, los espinores muestran características similares a las del grafeno original, mientras que para campos débiles exhiben oscilaciones rápidas que fueron explicadas utilizando el formalismo de Luttinger y Kohn. Se encontró, además, que las transiciones cuánticas entre subbandas magnéticas para campos débiles satisfacen una regla de selección nueva, inusual, **no reportada con anterioridad en la literatura física.**

Presentación en Eventos Internacionales

Parte del trabajo descrito en el punto 2, arriba, fue presentado en un Evento Internacional. El título del trabajo e información sobre el Evento se dan a continuación:

Título: Density of states in finite graphene superlattices

Evento: International Conference on Nano-photonics and Micro/Nano Optics Dec 7-9, 2016, Paris, France.

Otras cuestiones relacionadas con el trabajo

- a) Dos de los trabajos reportados en esta propuesta están enmarcados dentro de una colaboración científica iniciada hace más de 20 años entre las Universidades de Antioquia, Colombia, y la Universidad de la Habana.
- b) En los marcos de dicha colaboración se han obtenidos resultados sobre las propiedades de la magneto-absorción en superredes de grafeno en un campo magnético que han dado lugar a dos artículos más que fueron enviados a publicar recientemente a revistas internacionales de gran impacto.
- c) Es una investigación que tiene como objetivo futuro el estudio del transporte electrónico y absorción en superredes cuasi-periódicas de grafeno bajo diferentes campos externos.
- d) Las investigaciones realizadas se enmarcan dentro de la Línea de Investigación "Modelación de Estructura y Propiedades de Materiales" de la Universidad de la Habana.
- e) Los resultados publicados y los que resulten en el futuro conducirán a la defensa de una Tesis de Doctorado de un graduado joven de la Facultad de Física.