

Resumen de la tesis doctoral

La dimensionalidad de un sistema juega un papel fundamental en la conducta de la dinámica de los electrones que interactúan. En particular, la dimensionalidad cuasi-2D es responsable del comportamiento inusual observado en materiales de tipo grafeno y sistemas laminares basados en enlaces de tipo van der Waals. Además, estos efectos también se observan en materiales superconductores de alta temperatura crítica, incluso en el estado normal, debido a su baja dimensionalidad.

El estudio experimental del grafeno provocó una atención creciente a sus propiedades electrónicas, porque su estructura en forma de panal de abejas da lugar a una estructura de bandas con dos puntos nodales en la zona de Brillouin que determina una dinámica electrónica relativista de tipo Dirac. En el plano teórico, muchas propiedades del grafeno de una sola capa se han estudiado para permitir una mayor caracterización de este material. Estas propiedades son poco convencionales debido a la singular estructura de bandas del grafeno, que se describe en términos de fermiones de Dirac, lo que crea vínculos con ciertas teorías de la física de partículas. De hecho, varios grupos teóricos han empleado modelos fenomenológicos inspirados en la cromodinámica cuántica (es decir, los modelos Nambu-Jona-Lasinio y Gross-Neveu) aplicados al estudio de las propiedades del grafeno. Estas propiedades son responsables de inusuales fenómenos, como el efecto Hall fraccionario, que permite la posibilidad de catálisis magnética de un gap excitónico, ferromagnetismo y superconductividad.

El presente trabajo se centra en las propiedades electrónicas de los materiales de tipo grafeno, como el grafeno monocapa, el grafeno bicapa y el grafeno deformado. Además, se hace hincapié en sistemas desordenados ya que estos sistemas 2D son bastante sensibles al desorden. Tales propiedades tienen gran importancia para aplicaciones de dispositivos tecnológicos, como se puede observar en la creciente tecnología campos de tensiotrónica y espintrónica. El tipo de perturbaciones aplicadas a los sistemas de interés son las impurezas químicas, campos eléctricos externos, y las tensiones. Estas perturbaciones producen variaciones de las propiedades electrónicas cuando se comparan con los sistemas prístinos.

Las propiedades electrónicas se describen calculando el espectro del material mediante la teoría Tight-Binding y el modelo continuo a través de la ecuación relativista de Dirac. Al realizar el cálculo en el límite de baja energía se obtiene la dispersión lineal que es una de las características de las partículas relativistas sin masa de Dirac. Otros estudios del grafeno suspendido en el vacío revelaron que el grafeno puede cambiar de semi-metal a aislante debido a la formación de un espacio en el espectro fermiónico de electrones que resulta del condensado quirral (excitón). La ecuación de Dirac permite sondear aún más los efectos de la tensión, lo que lleva a un grafeno deformado, que puede verse como un tablero de prueba para las teorías cuánticas de campos en espacio-tiempos curvos.

Los métodos basados en las funciones de Green son las herramientas analíticas más robustas y comunes para calcular los observables físicos, como la densidad de estados (DoS). La DoS es una magnitud física fundamental que ayuda en la interpretación de varios datos experimentales principalmente para sistemas desordenados. El efecto de las impurezas se calcula empleando el método simple y autoconsistente Matriz en T. Para el caso considerado de concentración finita de impurezas, el método autoconsistente es más fiable. Sin embargo, con la excepción del efecto "espurio" obtenido para la vacante (divergencia DoS), que persiste incluso con la técnica autoconsistente, todos los demás observables tratados dentro de este formalismo estarán de acuerdo con los datos experimentales y otras aproximaciones teóricas.

Otras técnicas empleadas para estudiar las propiedades estructurales y electrónicas de estos interesantes sistemas se basan en métodos computacionales, como la teoría del funcional de la densidad, que sirven como herramientas complementarias a los métodos analíticos. Finalmente, cabe mencionar que también se emplean metodologías basadas en la teoría de fonones para investigar la estabilidad dinámica y la conductividad térmica de la red.