



ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE
INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN (Internos, Semilla, Inter y Multidisciplinarios, Externos):

Área del proyecto: Ciencias Básicas Ciencias Aplicadas

FACULTAD: CIENCIAS

DEPARTAMENTO: FÍSICA

LÍNEA DE INVESTIGACIÓN: Nanoestructuras

(verificable en el SAEW)

1 Proyecto de Investigación

Título:

Polarización Topológicamente Inducida de Valles Energéticos en Heteroestructuras de Grafeno y Nitrato de Boro.

Resumen del proyecto (máximo 200 palabras)

Proponemos estudiar teórica y experimentalmente la polarización de valles de momento en bicapas de grafeno/Nitrato de Boro (BN) y BN/BN inducida topológicamente.

Usar grados electrónicos de libertad cuánticos, por ejemplo el espín y pseudoespines, como plataformas para nuevos dispositivos electrónicos depende esencialmente de la habilidad para manipular estos grados de libertad. El número cuántico de valle es un pseudoespín que nombra los niveles de energía degenerados en la banda de conducción de un sólido periódico. La polarización de valles, es decir, la localización electrónica selectiva en un valle de momento y así su manipulación, puede ser lograda usando luz circularmente polarizada (LCP). En este proyecto, proponemos calcular la absorción óptica y medir la respuesta óptica de bicapas de grafeno en BN y BN en BN, sistemas con un débil acoplamiento espín-órbita, bajo LCP. Proponemos que la polarización de valles puede darse por un acoplamiento de naturaleza topológica, en este caso, el ángulo de rotación entre las bicapas. Los cálculos teóricos se harán con métodos tight-binding, que implican la diagonalización de matrices de cientos o miles de elementos. Para esto usaremos códigos desarrollados localmente y facilidades del National Energy Research Scientific Computing Center (NERSC) en USA. Los experimentos se realizarán en Oak Ridge National Laboratory (ORNL), USA y consisten en la toma de imágenes a resolución atómica y la medición de la respuesta óptica mediante espectroscopía electrónica de pérdidas de energía.

Palabras clave (3-5): Valletrónica, Grafeno, Nitrato de Boro.



ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE
INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL



4	Objetivos, hipótesis y resultados esperados de esta propuesta de investigación
	<ul style="list-style-type: none">- Objetivos- 1. Determinar el efecto del ángulo de rotación y de impurezas en monocapas y bicapas de grafeno y BN en las propiedades electrónicas y ópticas usando modelos teóricos de primeros principios.- 2. Determinar experimentalmente las propiedades ópticas de bicapas de grafeno y BN rotadas.- Hipótesis- Interacciones topológicas hacen las veces del acoplamiento espín-órbita en sistemas de espín para producir polarización de valles de momento.- Resultados esperados- Software para el cálculo de propiedades electrónicas para sistemas bidimensionales.- Publicación- Ponencia en congresos internacionales- Tesis de maestría- Potenciales Usuarios- Estudiante universitarios- Especialistas ciencias de materiales- Especialistas en Ingeniería Electrónica
5	Relevancia de esta propuesta de investigación con los objetivos científicos del departamento y su Línea de Investigación.
	<p>Este proyecto tienen como objetivo iniciar un programa al más alto nivel en el campo de las propiedades electrónicas y ópticas de los nuevos materiales bidimensionales, con acceso a la mejor instrumentación en microscopía electrónica, a supercomputadoras de primer orden a nivel internacional, al desarrollo de sofisticadas técnicas teóricas y publicaciones de alto impacto.</p> <p>El estudio de los materiales bidimensionales es un campo emergente en la materia condensada y la ciencia de materiales. Las potenciales aplicaciones de estos materiales son de un amplio espectro en nanotecnología, nanoelectrónica, optoelectrónica, biología y energía. Es pertinente que la EPN incursione en esta área de intenso interés por el número de investigadores y los recursos dedicados alrededor del mundo para su estudio. Este proyecto tiene un fuerte componente teórico para iniciar el entrenamiento de estudiantes a nivel de pregrado y postgrado de la EPN. También cuenta con una parte experimental que se llevará a cabo en Oak Ridge National Laboratory, USA, uno de los mejores centros de microscopía del mundo. Además, muchos cálculos necesitarán el uso de supercomputadoras y el desarrollo de códigos eficientes. Por tanto, el proyecto propuesto conjuga sinérgicamente varias disciplinas teóricas y experimentales, fundamentos físicos, técnicas matemáticas, cálculos a gran escala y temas de investigación vigentes.</p> <p>Los estudiantes y potenciales usuarios de los resultados de esta investigación, en particular la Maestría en Física de la EPN se beneficiarán enormemente al ser expuestos a técnicas modernas en microscopía electrónica, cálculos de propiedades ópticas de materiales y uso de facilidades a nivel internacional.</p> <p>La relevancia esencial de este proyecto radica en la convicción de realizar la mejor ciencia posible, con los mejores instrumentos, facilidades y técnicas a nuestro alcance para publicar en las mejores revistas del mundo.</p>



ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

VICERECTORADO DE

INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL



- Descripción del proyecto (Máximo una carilla)

El diseño de dispositivos electrónicos se basa en la habilidad de controlar a los portadores de carga para transmitir información. Por ejemplo, en la espintrónica se desea manipular el espín del electrón. Existen otros grados internos de libertad electrónicos que pueden, en principio, ser manipulados. En los sólidos periódicos es común encontrar mínimos en la banda de conducción y máximos en la banda de valencia en su estructura de bandas. Si los portadores de carga pueden ser confinados a uno de estos *valles*, es decir polarizar un valle electrónico, sería posible construir un dispositivo *valletrónico* [1-4]. Recientemente varios grupos alrededor del mundo han logrado este control mediante el uso de luz circularmente polarizada (LCP) en disulfuro de molibdeno (MoS_2) [5-8].

La característica esencial para crear un dispositivo valletrónico es un desbalance fuera de equilibrio de los portadores de carga entre los dos valles [8]. LCP produce este desbalance si el sistema carece de simetría de inversión y existe un mecanismo que levante la degeneración de niveles de energía relevantes que participen en las transiciones ópticas. El mecanismo de interacción estudiado hasta ahora, teórica y experimentalmente, ha sido el acoplamiento espín-órbita, presente en MoS_2 . Esta interacción es intrínseca a MoS_2 y es un resultado de ser un sistema no centro simétrico.

En este proyecto planteamos estudiar una interacción de naturaleza distinta hasta ahora no reportada en la literatura científica. Calcularemos teóricamente la absorción óptica bajo LCP de bicapas de grafeno en BN y BN en BN. La interacción necesaria para producir absorción selectiva de LCP está dada por el ángulo de rotación entre las capas, es decir, un mecanismo de naturaleza topológico, distinto al acoplamiento espín-órbita. Cuando las capas de grafeno y BN están a rotadas entre sí, las bandas electrónicas se doblan por el cambio de periodicidad del sistema, y esto levanta la degeneración entre niveles de energía en forma similar al efecto del acoplamiento espín-órbita en sistemas de espín. Teóricamente el doblamiento de las bandas se debe a la presencia de parámetros de acoplamiento adicionales entre los orbitales atómicos originalmente desacoplados [9].

Esto abre posibilidades para producir polarización de valles mediante formas similares de interacción topológica. Por ejemplo, impurezas, defectos, fronteras de grano modifican la periodicidad de la red cristalina y producen el mismo efecto que la rotación entre capas, es decir, doblamiento de bandas electrónicas.

Así para este proyecto estudiaremos teóricamente dos sistemas donde se hace presente este acoplamiento topológico:

1. Bicapas de grafeno/BN y BN/BN no alineadas.
2. Grafeno con impurezas.

En estos sistemas calcularemos la absorción óptica bajo LCP y determinaremos si existe absorción selectiva en cada valle. Este mecanismo de polarización de valles esclarece y generaliza el efecto del acoplamiento y simetría de inversión, ampliando el número de materiales que pueden ser usados en aplicaciones de valletrónica.

El estudio de sistemas de esta naturaleza implica el uso intensivo de herramientas computacionales. Usaremos las herramientas computacionales adquiridas con el proyecto para hacer estudiar los sistemas más pequeños en cuanto al número de átomos y para sistemas más grandes tenemos acceso a las supercomputadores de NERSC.

Además de modelado teórico, realizaremos experimentos para medir la respuesta óptica de bicapas de grafeno en BN y BN en BN usando espectroscopia de pérdida de energía de electrones (EELS por sus siglas en inglés) usando los microscopios electrónicos localizados en Oak Ridge National Laboratory (ORNL).

Así, este proyecto sinérgicamente involucra varias disciplinas científicas, modelamiento teórico en física para calcular propiedades electrónicas y ópticas, cálculos científicos usando las mejores facilidades computacionales en USA y el uso de técnicas experimentales de microscopía electrónica a resolución atómica para determinar la respuesta óptica de nuevos materiales. Además el proyecto servirá para financiar los estudios de un estudiante de la maestría en Física de la EPN y así fortalecer los postgrados de investigación en nuestra universidad.



ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

VICERECTORADO DE INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL



- Metodología y diseño de la investigación (Máximo una carilla)

Se van a desarrollar código para calcular la estructura electrónica de sistemas de bicapas de grafeno en BN y BN en BN y grafeno con impurezas usando paquetes comerciales como *Mathematica* y *Phyton*. Los cálculos teóricos se basan en modelos de primeros principios, principalmente técnicas *tight-binding*. Para materiales bidimensionales como el grafeno y BN hay varios modelos *tight-binding* propuestos en la literatura para calcular propiedades electrónicas y ópticas [10-13]. Sobre la base de estos modelos se estudiará su dependencia en términos del ángulo de rotación y con la presencia de impurezas. Cuando el ángulo de rotación entre capas cambia la celda unidad puede incluir decenas a miles de átomos [14]. Así, el cálculo de propiedades ópticas implica la diagonalización de matrices de cientos o miles de elementos. Nuestra experiencia con modelos relativamente eficientes escritos en *Mathematica* y paralelizados para usar 16 procesadores de la supercomputadora Hopper en el National Energy Research Scientific Computing Center (www.nersc.gov) es de aproximadamente de 30 horas para una red de 500 átomos. Así planteamos la siguiente metodología, estudiar sistemas de pocas decenas de átomos en una *workstation* a comprarse con el proyecto para examinar los modelos más simples y escribir código más eficiente en lenguajes apropiados como *Phyton*. Usar las supercomputadoras de NERSC para estudiar sistemas de cientos o miles de átomos y calcular sus propiedades ópticas.

En el plano experimental, usaremos los microscopios electrónicos localizados en ORNL, USA, en particular el NION-UltraSTEM 100. Este instrumento tiene una resolución menor a 0.1 nm y está dedicado como microscopio electrónico de transmisión y barrido (STEM por sus siglas en inglés). En modo STEM un microscopio electrónico ilumina una muestra de pocos nanómetros de grosor con una haz de electrones de diámetro menor a 0.1 nm. Un detector anular mide digitalmente la corriente de los electrones dispersados a través de la muestra a altos ángulos, mientras el haz de electrones rastrea el material. Así se forman imágenes a resolución atómica del material de interés. Así podremos determinar la estructura de las bicapas y conocer el ángulo de rotación entre ellas. Para estudiar grafeno o BN se usará un bajo voltaje de 60 kV para evitar dañar la red cristalina [15].

Para determinar la respuesta óptica se usará la espectroscopía de pérdida de energía de electrones (EELS por sus siglas en inglés). Cuando un haz de electrones acelerados en un alto voltaje pasan a través de una muestra de grosor nanométrico una pequeña fracción de estos pierde una cantidad de energía característica. La corriente de electrones transmitida se dirige a un espectrómetro de alta resolución que los separa de acuerdo a su energía cinética y graba un espectro de la energía perdida por los electrones. Este espectro posee información de las propiedades ópticas, enlace químico, composición química del material de estudio [16]. Con esta técnica estudiaremos la repuesta óptica de las bicapas de grafeno y BN rotadas entre sí. La preparación de muestras se llevará a cabo en ORNL.

Descripción de actividades

- Formulación teórica y experimental de los sistemas a estudiar, bicapas de grafeno/BN, BN/BN y monocapa de grafeno con impurezas (Leonardo Basile, Juan-Carlos Idrobo)
- Desarrollo del código, uso de herramientas computacionales (Leonardo Basile, estudiante de Maestría)
- Medición experimental de las propiedades ópticas de bicapas de grafeno/BN. BN/BN (Leonardo Basile, estudiante de maestría)
- Congresos internacionales y nacionales (Leonardo Basile, estudiante de maestría)
- Los involucrados en el proyecto discutirán todos los resultados obtenidos y participaran en la redacción de reportes y artículos de investigación.

Referencias

- [1] O. Gunawan et. al. Valley Susceptibility of an Interacting Two-Dimensional Electron System, *Phys. Rev. Lett.*, 97 (2006).
- [2] A. Rycerz et. al. Valley Filter and Valley Valve in Graphene, *Nature Physics*, 3 (2007).
- [3] Y. J. Zhang et. al. Electrically Switchable Chiral Light-Emitting Transistor, *Science*, 344 (2014).
- [4] K. F. Mak et. al. The Valley Hall Effect in MoS₂ Transistors, arxiv 1403.5039 (2014).
- [5] X. Xu, et. al. Spin and Pseudospins in Layered Transition Metal Dichalcogenides, *Nature Physics*, 10 (2014).
- [6] D. Xiao et. al. Valley-Contrasting Physics in Graphene: Magnetic Moment and Topological Transport, *Phys. Rev. Lett.*, 99 (2007).
- [7] K. F. Mak et. al. Control of Valley Polarization in Monolayer MoS₂ by Optical Helicity, *Nature Nanotechnology*, 7 (2012).
- [8] T. Cao et. al. Valley-selective Circular Dichroism of Monolayer Molybdenum Disulphide, *Nature Communications*, Jun (2012).
- [9] W. Ku et. al. Unfolding First-Principles Band Structures, *Phys. Rev. Lett.*, 104 (2010).
- [10] A.H. Castro Neto et. al. The Electronic Properties of Graphene, *Rev. Mod. Phys.*, 81 (2009).
- [11] L. Matthes et. al. Universal Infrared Absorbance of Two-Dimensional Honeycomb Group-IV Crystals, *Phys. Rev. B*, 87 (2013).
- [12] P. Moon and M. Koshino, Optical Absorption in Twisted Bilayer Graphene, *Phys. Rev. B*, 87 (2013).
- [13] S. et. al. Optical Conductivity of Disordered Graphene Beyond the Dirac Cone Approximation, *Phys. Rev. B*, 84 (2011).
- [14] S. Shallcross et. al., Emergent Momentum Scale, Localization, and van Hove Singularities in the Graphene Twist Layer, *Phys. Rev. B*, 87 (2013).
- [15] W. Zhou et. al. Single Atom Microscopy. *Microscopy and Microanalysis* (2012).

gryas