



ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL
DIRECCIÓN DE INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL

PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

Proyecto Interno Proyecto Semilla Proyecto Junior Proyecto Multi e Inter Disciplinario

Investigación Básica Investigación Aplicada Investigación Pedagógica Innovación

DEPARTAMENTO(S):

1. Física
- 2.

LINEA(S) DE INVESTIGACIÓN:

1. Nanoestructuras
- 2.



1 Proyecto de Investigación

Título: Propiedades electrónicas-topológicas de materiales bidimensionales

Resumen del proyecto (máximo 200 palabras)

Los materiales bidimensionales como grafeno, nitrato de boro hexagonal (h-BN), disulfuro de molibdeno (MoS₂) y otros tienen notables propiedades físicas que los hacen únicos por sus potenciales aplicaciones en energía, fotónica y nanoelectrónica.

Por otro lado el surgimiento del orden topológico en la materia condensada es uno de los triunfos de la física de estas últimas décadas. De hecho, uno de los objetivos de la materia condensada es la caracterización de las fases de materia. Algunas fases, como imanes y superconductores pueden ser entendidas en términos de la rotura espontánea de simetría. Pero, como hemos anotado, desde hace algún tiempo, es aparente que existe un tipo de orden mucho más sutil en el estado base de un sistema cuántico. El estudio de las propiedades topológicas en la materia condensada ha acelerado su desarrollo con la descripción teórica y su posterior realización experimental de los aislantes topológicos entre 2005-2007.

Con el surgimiento de sistemas bidimensionales como grafeno y MoS₂ se ha generado enorme interés en estudiar las propiedades topológicas de estos materiales. Trabajo previo realizado por uno de los proponentes de este proyecto muestra que ciertos sistemas bidimensionales, como bicapas de grafeno y h-BN, son candidatas para mostrar estas nuevas fases en la materia condensada. En este proyecto proponemos estudiar estas fases de forma teórica y establecer un protocolo para producir estas estructuras a nivel experimental.

Palabras clave (4-6):

grafeno, nitrato de boro hexagonal, orden topológico, síntesis de materiales bidimensionales



5.1 Objetivos

5.1.1 Objetivo General

Estudiar las propiedades topológicas de materiales bidimensionales como grafeno, nitrato de boro hexagonal, teórica y experimentalmente.

5.1.2 Objetivos Específicos

1. Determinar las propiedades electrónicas topológicas de materiales bidimensionales como bicapas y tricapas de grafeno y nitrato de boro hexagonal teóricamente.
2. Establecer un protocolo experimental para medir propiedades electrónicas de materiales bidimensionales en la medida que la capacidades de la EPN y de laboratorios del exterior.

5.2 Relevancia de esta propuesta de investigación y su relación con la(s) Línea(s) de investigación asociadas.

Este proyecto tiene como objetivo amplio desarrollar y continuar con el programa en materiales bidimensionales desde el punto de teórico y experimental. En la parte teórica hemos desarrollo varios códigos que permiten estudiar las propiedades electrónicas y ópticas de estos materiales. Ahora vamos a expandir este trabajo para considerar propiedades topológicas.

El estudio de los materiales bidimensionales es un campo emergente en la materia condensada y la ciencia de materiales. El Departamento de Física de la EPN ha visto necesario incluir esta área de investigación como uno de sus objetivos científicos dentro del Área de la Física de la Materia Condensada. Así, existe la línea específica de nanoestructuras relativa al estudio de síntesis, métodos de preparación y estudio de propiedades electrónicas. Temas que son los objetivos de este proyecto.

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.

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.

5.3 Productos esperados

- | | |
|---|--------------------------|
| a. Publicaciones científicas (obligatorio); | X |
| b. Disertación a la Comunidad Politécnica; | X |
| c. Proyecto de Titulación; | X |
| d. Tesis de Grado (maestría o doctorado); | <input type="checkbox"/> |
| e. Aplicación tecnológica construida o implementada; | <input type="checkbox"/> |
| f. Patente presentada; | <input type="checkbox"/> |
| g. Perfil de proyecto de mayor impacto científico, técnico, pedagógico o de innovación. | X |



5.4 Detalle de los resultados esperados (con relación a los objetivos)

El producto fundamental de este proyecto de la publicación de sus conclusiones en una revista de alto impacto. Para esto es esencial escoger temas de interés en el ámbito científico y proponer ideas novedosas. El estudio de las propiedades topológicas de nuevos materiales es una de las áreas de enorme desarrollo de los últimos años. Por tanto, esto redundará en beneficios para la comunidad de estudiantes que pueden acceder a nuevos temas de investigación, para el cuerpo de profesores al desarrollar áreas de investigación nuevas, y a la institución que puede ver incrementada su prestigio.

Además el desarrollo de una capacidad de investigación a nivel experimental es otro importante producto de este proyecto. La síntesis de materiales es un elemento esencial para desarrollar con éxito un programa en materiales. El grafeno fue sintetizado en el año 2004, y desde esa fecha ha habido una verdadera explosión en el desarrollo de técnicas de síntesis, no solo de grafeno, sino de toda una familia de materiales bidimensionales con las mas diversas propiedades. Contamos con la colaboración de la Universidad de los Andes, Colombia y del Laboratorio Nacional de Oak Ridge para la síntesis de grafeno y su caracterización. La técnicas desarrolladas en esas instituciones serán reproducidas en la EPN, de modo que la comunidad de estudiantes e investigadores se beneficien que técnicas y metodologías actuales.



ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL
DIRECCIÓN DE INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL

6	Descripción, metodología y cronograma de trabajo
----------	---

6.1 Descripción, metodología y diseño del proyecto (Máximo dos carillas)

Materiales como grafeno, nitrato de boro hexagonal y otros han sido intensamente estudiados por sus notables propiedades físicas. Ciertamente el grafeno es el material más estudiado en nanotecnología [1]. Sin embargo, y a pesar que ha sido ampliamente promocionado como un material *do it all*,. Sin embargo muchas de estas áreas requieren de intenso trabajo científico a nivel teórico y experimental..

Por ejemplo, en la valletrónica, que es la manipulación de valles energéticos en la estructura de bandas de sólidos periódicos, el grafeno parece no tener aplicación por carecer de un fuerte acoplamiento espín órbita. Ciertamente su particular estructura electrónica de bandas ha llevado a proponer esquemas para observar esta manipulación de valles [2-5]. Sin embargo no fue hasta el apareamiento de los metales de transición dicalcógenos, es decir, materiales con estructura química MX₂, donde M es un metal de transición como Mo, W y X es S, Se, el campo de la valletrónica se amplió considerablemente. Desde el punto de vista experimental la ocupación de valles se puede controlar con luz circularmente polarizada [6,7].

Así, dos son los elementos claves para polarizar valles energía, análogo a polarizar el espín del electrón, en la estructura electrónica de materiales bidimensionales dicalcógenos: ausencia de simetría de inversión y un fuerte acoplamiento espín órbita. Estos dos elementos están ausentes en grafeno. Por supuesto que se puede romper la simetría de inversión aplicando un campo eléctrico, pero la falta de un fuerte acoplamiento espín órbita impide polarizar valles de energía, y en principio, producir un dispositivo valletrónico.

Sin embargo es posible polarizar valles de momento en una estructura de grafeno. En una propuesta original de uno de los proponentes de este trabajo [8] una bicapa de grafeno sobre nitrato de boro hexagonal (h-BN) dispuestas en un ángulo produce polarización de valles. Al usar h-BN se rompe la simetría de inversión y la rotación entre las capas hace las veces del acoplamiento espín órbita. Es decir, que el grafeno nos sorprende de nuevo con física nueva que está por explorar.

Este proyecto justamente propone explorar esa física nueva que heteroestructuras, como la descrita, puede hacer posible. La pregunta que queremos responder es ¿una heteroestructura de grafeno puede presentar orden topológico? ¿puede una heteroestructura de grafeno ser considerada como un aislante topológico?

Un aislante es un material que tiene una brecha de energía, como el h-BN, para las excitaciones electrónicas, que separa el estado base de todos los otros estados excitados. Un aislante topológico es un material electrónico que tiene también una brecha de energía como un aislante ordinario pero tiene estados electrónicos protegidos en su superficie. Es decir, el material es un aislante en el volumen pero conduce en su superficie. Estos estados son posibles debido a una combinación de acoplamiento espín órbita y simetría de inversión temporal [9].

Evidentemente explorar la posibilidad de orden topológico en una heteroestructura de grafeno y h-BN es una consecuencia natural del trabajo previo realizado por el proponente de este proyecto.

Desde el punto de vista experimental es también crucial desarrollar capacidades de síntesis de materiales bidimensionales. Para esto proponemos desarrollar la exfoliación de grafeno, y h-BN para formar estructuras que puedan ser caracterizadas electrónicamente.

Usaremos tres rutas de fabricación de síntesis para fabricar estas estructuras. La exfoliación mecánica y la exfoliación líquida. La exfoliación mecánica ha sido la ruta para producir materiales bidimensionales de alta calidad. Ésta consiste en usar cinta adhesiva para exfoliar capas de material, repetir el proceso hasta tener nanohojas del material requerido. Este método ha sido usado para producir grafeno y otra variedad de materiales bidimensionales. La segunda ruta consiste en fabricar grafeno mediante cámaras de deposición adecuadas para el efecto. Este método permite una producción más uniforme del material y es altamente reproducible. El tercer método es la exfoliación líquida [10]. Esta consiste en preparar una solución con un solvente adecuado y como material a exfoliar se usa grafito en polvo, se procede a sonicar la solución. El grafeno en solución se extrae mediante centrifugación. Una vez extraído el grafeno se lo analiza con microscopía óptica, electrónica y raman para asegurar su calidad.

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL

De esta forma se puede ensamblar un dispositivo de grafeno y h-BN. La preparación de electrodos se la hace con litografía óptica o electrónica, dependiendo de la disponibilidad de equipos. La medición de la propiedades electrónicas se la realizará en la Universidad de los Andes, Colombia que cuenta con equipamiento adecuado para ensamblar y medir propiedades físicas de dispositivos electrónicos.

En resumen el procedimiento de trabajo es el siguiente:

1. Estudiaremos las propiedades topológicas de estructuras bidimensionales de grafeno y nitrato de boro hexagonal. Para esto desarrollaremos código para calcular estas propiedades, en particular, el número Z_2 [11] que define si una estructura bidimensional es un aislante topológico. Las heteroestructuras a estudiar son bicapas de grafeno y h-BN, y tricapas de grafeno y h-BN. En general estudiaremos heteroestructuras donde las capas n no están alineadas una respecto a las otra. Así, la rotación hace las veces de acoplamiento espín órbita. Este es un trabajo relevante científicamente porque hay pocos materiales bidimensionales identificados como aislantes topológicos [12].
2. Estableceremos un protocolo para sintetizar estructuras bidimensionales con el objeto de medir sus propiedades electrónicas en la medida de las facilidades para el efecto. En colaboración con la Universidad de los Andes, Colombia llevaremos adelante esta parte del proyecto en su fase inicial. Allí podremos realizar sintetizar, fabricar dispositivos de grafeno y h-BN y realizar medidas de transporte de estas heteroestructuras.

1. A.K. Geim y K.S. Novoselov The rise of graphene, *Nature Materials* 6, 183 (2007).
2. Rycerz, A., Tworzydło, J., & Beenakker, C.W. J. Valley filter and valley valve in graphene *Nat. Phys.* 3, 172-175 (2007).
3. Xiao, D., Yao, W., & Niu, Q. Valley-contrasting physics in graphene: Magnetic moment and topological transport, *Phys. Rev. Lett.* 99, 236809 (2007).
4. P. San-Jose, E. Prada, E. McCann, & H. Schomerus Pseudospin Valve in Bilayer Graphene: Towards Graphene-Based Pseudospintronics, *Phys. Rev. Lett.* 102, 247204 (2009).
5. D. Gunlycke & C.T. White, Graphene Valley Filter Using a Line Defect, *Phys. Rev. Lett.* 106, 136806 (2011).
6. K.F. Mak, K. He, J. Shan & T.F. Heinz, Control of valley polarization in monolayer MoS₂ by optical helicity, *Nature Nanotech.* 7, 494 (2012).
7. Cao, T., Wang, G., Han, W., Ye, H., Zhu, C., Shi, J., Niu, Q., Tan, P., Wang, E., Liu, B., & Feng, J. Valley-selective circular dichroism of monolayer molybdenum disulphide, *Nat. Commun.* 3, 887 (2012).
8. L. Basile & J-C. Idrobo, Topological-driven valley polarization in twisted graphene on hexagonal boron nitride, enviado a *Nature Physics* (2015).
9. M.Z. Hasan & C.L. Kane Topological insulators, *Rev. Mod. Phys.* 82, 3045 (2010).
10. K. R. Paton et al. Scalable production of large quantities of defect free few layer graphene by shear exfoliation in liquids
11. A.A. Soluyanov & D. Vanderbilt Wannier representation of Z_2 topological insulators, *Phys. Rev. B* 83, 035108 (2011)
12. Y. Ando, Topological Insulator Materials, *Journal of the Phys. Soc. Japan* 82, 102001 (2013).

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL

6	<p>6.2 Cronograma de trabajo anual: (Descripción)</p> <p>- Para la elaboración del cronograma de ejecución del proyecto se sugiere considerar el tiempo para la adquisición de equipos, reactivos y materiales de laboratorio.</p> <table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th style="text-align: left;">Año 1</th> <th style="text-align: center;">1-2</th> <th style="text-align: center;">3-4</th> <th style="text-align: center;">5-6</th> <th style="text-align: center;">7-8</th> <th style="text-align: center;">9-10</th> <th style="text-align: center;">11-12</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Compra de equipos</td> <td style="text-align: center;">x</td> <td style="text-align: center;">x</td> <td style="text-align: center;">x</td> <td style="text-align: center;">x</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>Desarrollo preliminar de código</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td style="text-align: center;">x</td> <td style="text-align: center;">x</td> <td style="text-align: center;">x</td> </tr> <tr> <td>Calculos electrónicos en bicapas</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td style="text-align: center;">x</td> <td style="text-align: center;">x</td> </tr> <tr> <td>Calculos electrónicos de tricapas</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td style="text-align: center;">x</td> </tr> <tr> <td>Diseño de experimentos</td> <td></td> <td></td> <td style="text-align: center;">x</td> <td style="text-align: center;">x</td> <td style="text-align: center;">x</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Ejecución de experimentos</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td style="text-align: center;">x</td> <td style="text-align: center;">x</td> <td style="text-align: center;">x</td> </tr> <tr> <td>Congresos internacionales</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>Presentacion de resultados</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table> <table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th style="text-align: left;">Año 2</th> <th style="text-align: center;">1-2</th> <th style="text-align: center;">3-4</th> <th style="text-align: center;">5-6</th> <th style="text-align: center;">7-8</th> <th style="text-align: center;">9-10</th> <th style="text-align: center;">11-12</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Compra de equipos</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>Desarrollo preliminar de código</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>Calculos electrónicos en bicapas</td> <td style="text-align: center;">x</td> <td style="text-align: center;">x</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>Calculos electrónicos de tricapas</td> <td style="text-align: center;">x</td> <td style="text-align: center;">x</td> <td style="text-align: center;">x</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>Diseño de experimentos</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>Ejecución de experimentos</td> <td></td> <td style="text-align: center;">x</td> <td style="text-align: center;">x</td> <td style="text-align: center;">x</td> <td style="text-align: center;">x</td> <td style="text-align: center;">x</td> </tr> <tr> <td>Congresos internacionales</td> <td></td> <td style="text-align: center;">x</td> <td></td> <td></td> <td style="text-align: center;">x</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Presentacion de resultados</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td style="text-align: center;">x</td> <td style="text-align: center;">x</td> </tr> </tbody> </table>	Año 1	1-2	3-4	5-6	7-8	9-10	11-12	Compra de equipos	x	x	x	x			Desarrollo preliminar de código				x	x	x	Calculos electrónicos en bicapas					x	x	Calculos electrónicos de tricapas						x	Diseño de experimentos			x	x	x		Ejecución de experimentos				x	x	x	Congresos internacionales							Presentacion de resultados							Año 2	1-2	3-4	5-6	7-8	9-10	11-12	Compra de equipos							Desarrollo preliminar de código							Calculos electrónicos en bicapas	x	x					Calculos electrónicos de tricapas	x	x	x				Diseño de experimentos							Ejecución de experimentos		x	x	x	x	x	Congresos internacionales		x			x		Presentacion de resultados					x	x
Año 1	1-2	3-4	5-6	7-8	9-10	11-12																																																																																																																									
Compra de equipos	x	x	x	x																																																																																																																											
Desarrollo preliminar de código				x	x	x																																																																																																																									
Calculos electrónicos en bicapas					x	x																																																																																																																									
Calculos electrónicos de tricapas						x																																																																																																																									
Diseño de experimentos			x	x	x																																																																																																																										
Ejecución de experimentos				x	x	x																																																																																																																									
Congresos internacionales																																																																																																																															
Presentacion de resultados																																																																																																																															
Año 2	1-2	3-4	5-6	7-8	9-10	11-12																																																																																																																									
Compra de equipos																																																																																																																															
Desarrollo preliminar de código																																																																																																																															
Calculos electrónicos en bicapas	x	x																																																																																																																													
Calculos electrónicos de tricapas	x	x	x																																																																																																																												
Diseño de experimentos																																																																																																																															
Ejecución de experimentos		x	x	x	x	x																																																																																																																									
Congresos internacionales		x			x																																																																																																																										
Presentacion de resultados					x	x																																																																																																																									
7	<p>Fechas de inicio y fin</p> <p>1ero de febrero de 2016 y tendrá duración de 2 años.</p>																																																																																																																														
8	<p>Infraestructura, equipos y fondos adicionales.</p>																																																																																																																														

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL

8.1 Infraestructura y equipos

El Departamento de Física cuenta con instrumentación básica en el laboratorio de películas delgadas donde existe espacio disponible para llevar adelante el proyecto. Existe también instrumentos para caracterizar ópticamente materiales y hay acceso al equipamiento de otras Universidades como la ESPE, la UPS y la U. Central de Quito. Adicionalmente contamos con la colaboración y asesoramiento de la Universidad de los Andes, Colombia y el Laboratorio Nacional de Oak Ridge, USA para desarrollar las técnicas de síntesis, caracterización y materiales bidimensionales, fabricación de dispositivos y medición de propiedades de transporte.

8.2 Breve justificación del equipo requerido

Este proyecto y otros recientemente presentados en la línea de materiales bidimensionales pretender ser la semilla para establecer un robusto programa en síntesis, caracterización, fabricación de dispositivos y estudios teóricos de sistemas bidimensionales como grafeno, h-BN y otros. Por esto, los instrumentos de compra forman parte de un plan para establecer un laboratorio mínimo para desarrollar esta actividades. Con este proyecto pretendemos comprar instrumentación para la síntesis de grafeno e insumos para su producción. Con los recursos del proyecto de comprar una equipo de evaporación para fabricar electrodos y otros equipos secundarios.

8.3 Fondos Adicionales

- *Otros fondos de otros organismos (si los hubiere)*



ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL
DIRECCIÓN DE INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL

9

Presupuesto estimado para la ejecución del presente proyecto (anual)

- Los costos para la elaboración del presupuesto estimado no deben incluir IVA.
- Las maquinarias y equipos deberán tener una proforma local con un representante autorizado en el país.
- En el caso de PIMI, se deberá aclarar en cual departamento permanecerán las maquinarias y equipos


Primer Año

Lista de ítems	Cantidad solicitada (US \$)	Porcentaje (%)
1. Contratación Servicios Personales por Contrato <i>Ayudantes de Investigación</i>		
Subtotal	3000	3.75
2. Maquinaria y Equipos		
Equipo de deposición de electrodos		
Subtotal	60000	75
3. Reactivos y materiales de laboratorio		
Subtotal	3000	3.75
4. Literatura especializada		
Subtotal		
5. Viajes técnicos y de muestreo		
Subtotal	3000	3.75
6. Presentación de ponencias en congresos internacionales y publicaciones		
Subtotal		
TOTAL PRESUPUESTO	69.000,00 + IVA	86



ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
VICERECTORADO DE INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL
DIRECCIÓN DE INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL

9	Presupuesto estimado para la ejecución del presente proyecto (anual) <ul style="list-style-type: none">- Los costos para la elaboración del presupuesto estimado no deben incluir IVA.- Las maquinarias y equipos deberán tener una proforma local con un representante autorizado en el país.- En el caso de PIMI, se deberá aclarar en cual departamento permanecerán las maquinarias y equipos <p style="text-align: center;"><u>Segundo Año</u></p>		
	Lista de ítems	Cantidad solicitada (US \$)	Porcentaje (%)
	1. Contratación Servicios Personales por Contrato Ayudantes de Investigación	3000	3.75
	Subtotal		
	2. Maquinaria y Equipos		
	Equipo de deposición de electrodos		
	Subtotal		
	3. Reactivos y materiales de laboratorio	3000	3.75
	Subtotal	3000	
	4. Literatura especializada		
	Subtotal		
	5. Viajes técnicos y de muestreo	3000	3.75
	Subtotal	3000	
	6. Presentación de ponencias en congresos internacionales y publicaciones	2000	
	Subtotal	2000	2.5
	TOTAL PRESUPUESTO	11.000,00 + IVA	14

10	Lugar y Fecha / Firma del Director del Proyecto	
	Quito, 14..... de Julio..... del 2015 Nombre: Dr. Leonardo Basile CC: 1708794332	 Firma del Director