

Propiedades electrónicas de sistemas semimetálicos

Objetivos

Esta propuesta contempla la fabricación y el estudio experimental de las propiedades electrónicas de sistemas semimetálicos que presentan propiedades exóticas, tales como semimetales de Dirac o de Weyl. Específicamente se pretende estudiar compuestos de las familias TR y TR_2 (T =metal de transición, R =Te, Bi, Sb, Mo) tratando de correlacionar diversos fenómenos macroscópicos como magnetorresistencia extrema y efecto Hall anómalo con propiedades intrínsecas tales como la estructura de bandas y la superficie de Fermi.

Antecedentes

Los semimetales son sistemas cuyas propiedades electrónicas están a medio camino entre un metal y un aislante. Cualitativamente pueden considerarse como un semiconductor indirecto en el cual las bandas de valencia y conducción están ligeramente superpuestas. Esto resulta en varias propiedades singulares como por ejemplo una baja densidad de portadores y densidad de estados electrónicos cercanos del nivel de Fermi e_F , a la par de propiedades eléctricas típicas de efectos multibanda como una magnetorresistencia pronunciada. A diferencia de un semiconductor, sin embargo, la resistividad a temperatura nula es finita. Esto se debe a que la densidad de estados electrónica en el nivel de Fermi, a pesar de estar profundamente deprimida, no es nula. Los elementos semimetálicos (también conocidos como metaloides) son el telurio, antimonio, selenio, bismuto, carbono (en forma de grafito), fósforo, arsénico, entre otros.

En los últimos años se ha despertado un gran interés en una nueva clase de aislantes que difieren cualitativamente con los aislantes tradicionales. En estos nuevos aislantes, las bandas de valencia y conducción se invierten (estados de la banda de conducción tienen menor energía que estados de la banda de valencia). Este efecto puede ocurrir en sólidos con relaciones de dispersión electrónicas fuertemente dispersivas. A pesar de que las bandas están parcialmente solapadas, una fuerte interacción espín-órbita puede abrir un gap considerable. En estos sistemas, además, la inversión de las bandas redundará en estados superficiales metálicos. O sea, las propiedades de bulk se corresponden a un aislante mientras que la superficie es metálica.

Las propiedades metálicas de la superficie no pueden destruirse por daño físico o químico. Son estados metálicos que dependen únicamente de ciertas simetrías del sistema, en particular de la simetría de inversión temporal. Se dice entonces que son estados protegidos por simetría y consecuentemente estos sistemas reciben el nombre de aislantes topológicos (AT), para diferenciarlos de los aislantes tradicionales. Los compuestos $HgTe$ [1] y Bi_2Se_3 [2] constituyen los ejemplos más notorios de AT.

En los semimetales topológicos (ST) el gap que se abre después de la inversión de bandas no es completo. Por el contrario, en ciertos puntos de alta simetría del espacio recíproco, las bandas se tocan en un punto tal cual ocurre en el grafeno. En estos puntos la relación de dispersión electrónica es lineal, lo que confiere características especiales a las excitaciones: cuasipartículas fermiónicas ultrarrelativistas de masa nula. A diferencia del grafeno, los ST son sistemas tridimensionales. [3]

Diversos semimetales parecen tener esta peculiaridad en su estructura de bandas: Cd_3As_2 [4], WTe_2 [5], $TaAs$ [6], entre otros. Los ST también poseen estados superficiales topológicos (protegidos por simetría) y se clasifican en semimetales de Dirac o Weyl, dependiendo si existe o no simetría de inversión espacial de la red atómica subyacente. [3,7]

Más allá del interés en estos sistemas por cuestiones fundamentales, una propiedad física común en los ST es la presencia de un efecto conocido como magnetorresistencia extrema [5,8]: la resistividad eléctrica cambia algunos órdenes de magnitud en presencia de un campo magnético externo. A diferencia de la magnetorresistencia colosal negativa de las manganitas, en el caso de las

ST la magnetorresistencia es positiva. En aquellas, el efecto puede explicarse por un mecanismo de doble intercambio que involucra orbitales atómicos y donde el acople espín-red atómica es sumamente relevante. En los ST, la magnetorresistencia extrema no tiene aún un origen claro, pero se trata definitivamente de una propiedad meramente asociada al mar de Fermi.

Actividades y Metodología

Primer año: Supone el crecimiento y caracterización de muestras monocristalinas en base a Telurio, Bismuto, Molibdeno y Antimonio por el método de auto-flujo, caracterización de las mismas a través de diversas técnicas (XRD, EDX, RBS) y estudios preliminares de las propiedades electrónicas midiendo transporte eléctrico en condiciones de muy bajas temperaturas (hasta 0.03 K). Paralelamente se deberían tomar algún curso avanzado de Sólidos y otro de Magnetismo dentro del plan de Formación del Doctorado.

Segundo año: Completar estudios empleando otras técnicas como calor específico y magnetización. Ampliar estudios de transporte eléctrico en presencia de campo magnético (magnetorresistencia) y estudiar superficie de Fermi mediante el efecto Shubnikov de Haas. Sería deseable completar formación con algún curso de Transporte y Propiedades de No Equilibrio.

Tercer año: presentación de resultados en alguna conferencia y publicación de los mismos. En la medida de lo posible, tratar de hacer cálculos teóricos con diferentes técnicas de la estructura de banda.

Cuarto-Quinto año: dependiendo de los resultados obtenidos y el grado de avance, estudiar otros sistemas similares y, en la medida de lo posible, realizar experimentos con técnicas espectroscópicas tipo ARPES para comprobar resultados de transporte y cálculos.

Factibilidad

El trabajo se desarrollará principalmente en el Laboratorio de Bajas Temperaturas (LBT) del Centro Atómico Bariloche. El mismo cuenta con todas las facilidades para el crecimiento de muestras (elementos puros, hornos) y caracterización de las mismas (rayos X, espectroscopía EDS, etc).

Para el estudio de las propiedades electrónicas, el laboratorio cuenta con diversos equipos criogénicos (^4He , ^3He , dilución, criogeneradores) que permiten operar entre 0.025K y 350K, además de diversos imanes superconductores (de hasta 18 Tesla). En los mismos se encuentran operativos diversas técnicas experimentales como: microcalorimetría, magnetometría de SQUID y torque, dilatometría capacitiva, transporte eléctrico y térmico entre otras.

El plan de trabajo está respaldado por dos subsidios: **PIP 112-2013-0100576** válido hasta 2019 y un **PICT2016** recientemente otorgado válido hasta 2020. Los mismos permitirán afrontar gastos de insumos básicos (elementos puros, consumibles varios) y la presentación de los resultados en alguna reunión científica.

En el laboratorio ya se han crecido exitosamente monocristales de excelente calidad del semi-metal WTe_2 y PtBi_2 , que presentan efectos magnetorresistivos extremos comparables a los reportados en la literatura [5,8] (ver Fig. 1), resultados que fueron presentados en diversas conferencias. [9-12]

Por otro lado, el LBT cuenta con una amplia experiencia en mediciones termodinámicas y de transporte a muy bajas temperaturas y altos campos magnéticos en sistemas correlacionados. [13]

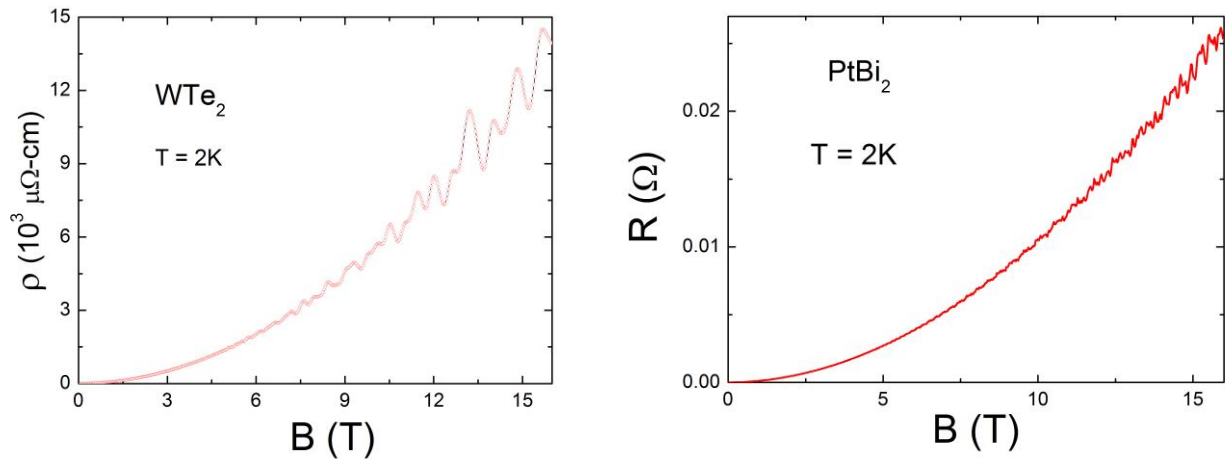


Figura 1. Magnetorresistencia extrema en cristales de WTe_2 y $PtBi_2$ crecidos en el Laboratorio de Bajas Temperaturas del Centro Atómico Bariloche (marzo de 2017). Las oscilaciones a campos elevados corresponden al efecto Shubnikov-de Haas.

Bibliografía

- [1] Bernegiv B. A. et al., *Science* **314**, 1757 (2006).
- [2] Zhang H. et al., *Nat. Phys.* **5**, 438 (2009).
- [3] Armitage N. P., Mele E. J., A. Vishwanath, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015001 (2018).
- [4] Liu Z. K. et al., *Nat. Mater.* **13**, 677 (2014).
- [5] Ali M. N. et al., *Nature* **514**, 205 (2014).
- [6] Xu S. Y. et al., *Science* **349**, 613 (2015).
- [7] Yan B., Felser C., *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **8**, 337 (2017).
- [8] Gao W. et al., *Phys. Rev. Lett.* **118**, 256601 (2017).
- [9] Correa V. F., *Magnetorresistencia extrema en los semimetales WTe_2 y $PtBi_2$* . VII Reunión Nacional de Sólidos. Noviembre 22-24, 2017. Bahía Blanca.
- [10] Correa V. F., *Electrical properties of the semimetallic alloys $Pt_{1-x}Au_xBi_2$* . XXIII Latin American Symposium on Solid State Physics. Abril 10-13, 2018. Bariloche.
- [11] Zapata N., *Quantum oscillations in extreme magnetoresistance semimetal WTe_2* . XV Physics Conference. Noviembre 20-23, 2017. Quito.
- [12] Zapata N., *Magnetotransport properties and quantum oscillations of WTe_2 semimetal*. 11th Summer School IEEE Magentics. Junio 3-8, 2018. Quito.
- [13] Correa V. F., et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **28**, 346003 (2016).