



Bellavista, 16 de mayo, 2022

Señor(a):

RESOLUCIÓN DECANAL N° 063-2022-D-FCNM. - Bellavista 16 de mayo 2022.- EL DECANO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO:

Visto el OFICIO N° 03-2022-JEPI-FCNM, recibido en forma virtual el 27 de abril del 2022, por medio del cual el presidente del Jurado Evaluador del Proyecto de Investigación para optar el Título Profesional de Licenciado en Física, informa, que el proyecto presentado por el Sr. Bachiller JIRÓN VICENTE, Andrés Guiseppe, ha sido evaluado en su estructura, metodología y contenido temático, aprobando su desarrollo.

CONSIDERANDO:

Que, el Art. 32° de la Ley Universitaria Ley N° 30220, norma que las Facultades son unidades de formación académica, profesional y de gestión, el Art. 70° numeral 2, 3 y 5, norma las atribuciones del Decano, a través de los Directores de los Departamentos, Directores de las Escuelas Profesionales, Unidad de Investigación y la unidad de Posgrado, y las demás dependencias, respectivamente; a fin de lograr un desarrollo académico y administrativo eficaz y eficiente, concordante con la misión, visión y valores de la Facultad FCNM;

Que, mediante Resolución del Consejo Universitario N° 245-2018-CU de fecha 30 de octubre del año 2018, se aprobó el Reglamento de Grados y Títulos de Pregrado de la Universidad Nacional del Callao, señalando en el Art. 33° que la titulación profesional por la modalidad de tesis se realiza por uno de los dos procedimientos: a) Titulación sin ciclo de tesis, y b) Titulación con ciclo de tesis; asimismo, en su Art. 73° precisa sobre la documentación que debe presentar el estudiante o egresado para aprobar su proyecto de tesis y acceder a la titulación profesional mediante dicha modalidad;

Que, mediante Resolución N° 051-2022-D-FCNM, de fecha 28 de marzo del año 2022, se designó al Jurado Evaluador del Proyecto Investigación para optar el Título Profesional de Licenciado en Física presentado por el Sr. JIRÓN VICENTE, Andrés Guiseppe, titulado: “PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y TOPOLÓGICAS DE NANOTUBOS DEFORMADOS CON GEOMETRÍA CATENOIDAL EN REDES DE LIEB”, conformado por los docentes: Dr. Richard Saúl. Toribio Saavedra (Presidente); Dr. Jesús Félix Sánchez Ortiz (Vocal); Mg. Carlos Alberto Lévano Huamaccto (Secretario); Mg. Jorge Martín Quispe Sánchez (Suplente);

Que, corrido el trámite de la solicitud del recurrente, el presidente del Jurado Evaluador del Proyecto de Tesis presenta en forma virtual en mesa de partes de la Facultad de Ciencias Naturales y Matemática el 27 de abril del año 2022 el Dictamen solicitado según Reglamento, señalando que el Proyecto de Tesis reúne los requisitos de forma y fondo para ser desarrollado como tesis de Licenciatura, aprobándolo;

Estando a lo glosado; a la documentación que obra en autos; a lo normado en el Reglamento de Grados y Títulos; y en uso de las atribuciones que le confiere el Art. 189° del Estatuto de la Universidad Nacional del Callao, concordante con el Art. N° 70° de la ley universitaria, Ley N° 30220;

RESUELVE:

1°. APROBAR, el Proyecto de Investigación para optar el Título Profesional de Licenciado en Física titulado: “PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y TOPOLÓGICAS DE NANOTUBOS DEFORMADOS CON GEOMETRÍA CATENOIDAL EN REDES DE LIEB”, presentado por el Sr. Bachiller JIRÓN VICENTE, Andrés Guiseppe, el mismo que forma parte integrante de la presente Resolución; en consecuencia, **AUTORIZAR**, el desarrollo del mencionado proyecto para optar el título profesional de Licenciado en Física, teniendo un plazo máximo de dos (02) años para la culminación y presentación de la tesis respectiva, a partir de la fecha de la presente Resolución.

2°. DESIGNAR, al docente Dr. Pablo Guillermo Gonzales Ormeño, como Asesor y Co-Asesor al Dr. Ángel Eduardo Obispo Vásquez, para el desarrollo del proyecto de tesis aprobado en el numeral anterior.

3°. AUTORIZAR, a la Unidad de Investigación inscribir el tema de tesis y su autor señalado en la presente Resolución, en el Libro de Registro de Tesis, de acuerdo con el Reglamento de Grados y Títulos vigente.

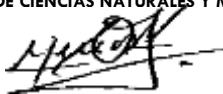

4°. TRANSCRIBIR, la presente Resolución a los miembros del Jurado Evaluador, profesor asesor, Escuela Profesional y Departamento Académico de Física, Unidad de Investigación, Comisión de Grados y Títulos e interesado, para conocimiento y fines.

REGÍSTRESE, COMUNÍQUESE Y ARCHÍVESE

Fdo. **Dr. JUAN ABRAHAM MÉNDEZ VELÁSQUEZ**. -Decano y Presidente del Consejo de Facultad de la Facultad de Ciencias Naturales y Matemática de la Universidad Nacional del Callao.

Fdo. **Mg. GUSTAVO ALBERTO ALTAMIZA CHÁVEZ**. -Secretario Académico
Lo que transcribo a usted para los fines pertinentes.

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA



Dr. Juan Abraham Méndez Velásquez
Decano



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA
D E C A N A T O



PROVEÍDO N°245-2022-D-FCNM

Ref. : **OFICIO N°03-2022-JEPI-FCNM**

Acta de la Sesión de Trabajo Virtual del Jurado Evaluador del Proyecto de Investigación

Bach. JIRÓN VICENTE, Andrés Guiseppe

Escuela Profesional de Física

Expediente N°502.08.2021

DERÍVESE, el documento de la referencia a la **Oficina de Secretaría Académica de la FCNM**, para la emisión de la respectiva resolución.

Bellavista, 27 de abril de 2022

Atentamente,

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA



Dr. Juan Abraham Méndez Velásquez
Decano

JAMV/hc
📁 Archivo

Bellavista, 27 de abril de 2022

OFICIO N° 03-2022-JEPI-FCNM

Señor Doctor

Juan Abraham Méndez Velásquez

Decano de la facultad de Ciencias Naturales y Matemática

Presente. -

De mi consideración:

Me dirijo a usted para expresarle un cordial saludo y, a la vez, remitirle el Acta de la Sesión de Trabajo Virtual del Jurado Evaluador del Proyecto de Investigación titulado: **“PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y TOPOLÓGICAS DE NANOTUBOS DEFORMADOS CON GEOMETRÍA CATENOIDAL EN REDES DE LIEB”** presentado por el Bachiller en Física, Sr. **Jirón Vicente, Andrés Guisepppe**, en la que se exponen las observaciones encontradas, concluida su evaluación, así como la citación y asistencia respectiva.

Al respecto debo indicar que, habiéndose aprobado la ejecución del referido proyecto de investigación, se adjunta el informe colegiado con dictamen aprobatorio para que, según lo dispuesto por el Reglamento de Grados y Títulos de Pregrado de la Universidad Nacional del Callao, aprobado por Resolución N° 245-2018-CU, su Despacho emita la Resolución de aprobación del Proyecto de Investigación correspondiente.

Sin otro particular, quedo de usted.

Atentamente,

JURADO EVALUADOR DE PROYECTO DE INVESTIGACIÓN (FCNM)



Dr. Richard Saúl Toribio Saavedra

Presidente

C.C.: Archivo

**ACTA DE SESIÓN DE TRABAJO VIRTUAL DEL JURADO EVALUADOR DE PROYECTO DE TESIS
DESIGNADO POR RESOLUCIÓN N° 051-2022-D-FCNM, CELEBRADA EL DÍA MARTES 19-04-2022**

Siendo las 10:00 horas del día martes diecinueve de abril del año dos mil veintidós, bajo la presidencia del Dr. Richard Saúl Toribio Saavedra, y con la asistencia de los profesores, Dr. Jesús Félix Sánchez Ortiz y Mg. Carlos Alberto Lévano Huamaccto, miembros del Jurado encargado de dictaminar sobre el proyecto de investigación de pregrado, designado por Resolución N° 051-2022-D-FCNM, se procedió a revisar y evaluar el Proyecto de Investigación titulado: “PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y TOPOLÓGICAS DE NANOTUBOS DEFORMADOS CON GEOMETRÍA CATENOIDAL EN REDES DE LIEB”, presentado por el Bachiller, Sr. ANDRÉS GUISEPPE, Jirón Vicente.

Estando a lo dispuesto en el Reglamento de Grados y Títulos de Pregrado de la Universidad Nacional del Callao, aprobado por Resolución N° 245-2018-CU, el Jurado presente – por unanimidad – tomó el siguiente acuerdo:

ACUERDO ÚNICO: Aprobar el Proyecto de Investigación titulado “**PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y TOPOLÓGICAS DE NANOTUBOS DEFORMADOS CON GEOMETRÍA CATENOIDAL EN REDES DE LIEB**”, del Bachiller Sr. **ANDRÉS GUISEPPE JIRÓN VICENTE**, para su ejecución en los términos y plazos indicados y remitirlo al Señor Decano de la Facultad de Ciencias Naturales y Matemática, adjuntando el informe colegiado con dictar aprobatorio, para los trámites subsiguientes.

Siendo las 12:00 horas del día martes diecinueve de abril del año dos mil veintidós, el presidente del Jurado Evaluador dio por culminada la sesión agradeciendo la participación de los miembros, por lo que dando fe de lo actuado firman la presente Acta.



Dr. Richard S. Toribio Saavedra

Presidente



Dr. Jesús F. Sánchez Ortiz

Vocal



Mg. Carlos A. Lévano Huamaccto

Secretario

c.c.: Archivo

Bellavista, 8 de abril del 2022

Señores:

Dr. Jesús Félix Sánchez Ortiz
Mg. Carlos Alberto Lévano Huamaccto
Mg. Quispe Sánchez Jorge Martin

Jurado Evaluador del Proyecto de Tesis
RESOLUCIÓN DECANAL N° 051-2022-D-FCNM

Es grato saludarles cordialmente y a la vez de citarlos vía meet, desde nuestras casas, a la sesión de trabajo en el día y hora que se indica.

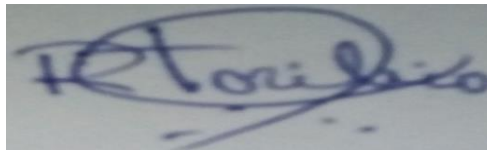
Día: Martes 19 de abril del 2022

Hora : 10:00 a.m

Link : <https://meet.google.com/dmk-qkme-auf>

AGENDA:

Proyecto de Tesis presentado por la Bach. JIRON VICENTE, ANDRES GUISEPPE. Modalidad de tesis sin ciclo de tesis, titulado: **“PROPIEDADES ELECTRONICAS Y TOPOLOGICAS DE NANOTUBOS DEFORMADOS CON GEOMETRIA CATENOIDAL EN REDES DE LIEB”**.



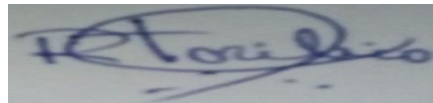
Dr. Richard S. Toribio Saavedra
Presidente

cc.Archivo

ASISTENCIA A LA REUNIÓN DE TRABAJO VIRTUAL DEL JURADO EVALUADOR DEL
PROYECTO DE INVESTIGACIÓN DE FECHA: 19-04-2022

RESOLUCIÓN DECANAL N° 051-2022-D-FCNM

Bach.: JIRON VICENTE, ANDRES GUISEPPE



Dr. Richard Saúl Toribio Saavedra



Dr. Jesús Félix Sánchez Ortiz



Mg. Carlos Alberto Lévano Huamaccto

Mg. Jorge Martin Quispe Sánchez

c.c.: Archivo

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA
ESCUELA PROFESIONAL DE FÍSICA



PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

“ PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y TOPOLÓGICAS DE
NANOTUBOS DEFORMADOS CON GEOMETRÍA CATENOIDAL
EN REDES DE LIEB ”

ANDRÉS GUISEPPE JIRÓN VICENTE

Callao, 2022

PERÚ

INFORMACIÓN BÁSICA

Facultad: Facultad de Ciencias Naturales y Matemática.

Unidad de Investigación: Facultad de Ciencias Naturales y Matemática.

Título: Propiedades electrónicas y topológicas de nanotubos deformados con geometría catenoidal en redes de Lieb.

Autor: Bach. Andrés Guiseppe Jirón Vicente.

Asesor: Dr. Pablo Guillermo Gonzales Ormeño.

Co-Asesor: Dr. Ángel Eduardo Obispo Vásquez.

Lugar de ejecución: Universidad Nacional Del Callao.

Tipo de investigación: Aplicada.

Unidad de análisis: Nanotubos deformados con geometría catenoidal en redes de Lieb.

Índice

INTRODUCCIÓN	2
I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	4
1.1. Descripción de la realidad problemática	4
1.2. Formulación del problema	5
1.2.1. Problema general	5
1.2.2. Problemas específicos	5
1.3. Objetivos	5
1.3.1. Objetivo general	5
1.3.2. Objetivos específicos	6
1.4. Justificación	6
1.5. Limitantes de la investigación	7
II. MARCO TEÓRICO	7
2.1. Antecedentes: Internacional y nacional	7
2.2. Bases teóricas	10
2.2.1. Nanotubos de carbono deformados con geometría catenoidal	10
2.2.2. Nanotubos deformados con geometría catenoidal en redes de Lieb	12
2.3. Conceptual	17
2.3.1. Estructura electrónica de la red de Lieb	17
2.4. Definición de términos básicos	20
III. HIPÓTESIS Y VARIABLES	21
3.1. Hipótesis	21
3.1.1. Hipótesis generales	21
3.1.2. Hipótesis específicas	21
3.2. Definición conceptual de variables	22
3.2.1. Operacionalización de variables	22
IV. DISEÑO METODOLÓGICO	22
4.1. Tipo y diseño de investigación	22
4.2. Método de investigación	23
4.3. Población y muestra	23
4.4. Lugar de estudio	23
4.5. Técnicas e instrumentos para la recolección de la información.	23
4.6. Análisis y procesamiento de datos	24
V. CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES	25
VI. PRESUPUESTO	25
VII. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	26
VIII. ANEXOS	30
Matriz de consistencia	30

INTRODUCCIÓN

La idealización de una estructura electrónica perfectamente plana en materiales bidimensionales, como es el caso del grafeno, puede ser considerada una visión simplificada del mundo real, ya que se ha demostrado experimentalmente que estas estructuras muestran todo tipo de deformaciones locales, induciendo determinados efectos sobre los portadores de carga que logran modificar las propiedades electrónicas del material en el punto de la deformación [1,2]. Por lo que es necesario estudiar los diferentes tipos de defectos locales (defectos cónicos e hiperbólicos) al momento de querer obtener una correcta descripción de las propiedades electrónicas y topológicas de materiales bidimensionales como el grafeno. El estudio de las deformaciones locales puede ser usado como un primer acercamiento al momento de querer estudiar otras deformaciones más complejas [3], como las que se encuentran en los fullerenos (estructuras construidas a partir de anillos pentagonales de carbono capaces de cerrar la red de grafeno en una jaula esférica) [4] y los nanotubos de carbono (estructuras construidas a partir de láminas de grafeno enrolladas en forma cilíndrica) [5,6], abriendo un sin fin de nuevas e hipotéticas estructuras (que no demoran en ser sintetizadas).

En ese contexto, basados en la geometría de las superficies mínimas de H. Schwarz y R. Neovius [7], L. Mackay y H. Terrones propusieron teóricamente una estructura exótica construida con átomos de carbono denominada “Schwarzita” [8,9], la cual debería poseer múltiples deformaciones catenoidales en su estructura interna que harían que ésta presente propiedades únicas de transporte electrónico [10-12]. Sin embargo, debido a que los métodos experimentales aún no estaban muy desarrollados, esta estructura ha logrado ser sintetizada recientemente [13], iniciando una serie de investigaciones relacionadas a estructuras gráficas basadas en la schwarzita. Así pues, entre estas estructuras se encuentran los nanotubos de carbono deformados con geometría catenoidal [14-18], cuyas estructuras han mostrado una alta conductividad eléctrica y disipación térmica en todas las direcciones, generando así una brecha para potenciales aplicaciones tecnológicas [19,20].

No obstante, dentro del estudio de las ciencias de los materiales, es importante mencionar que los nanotubos de carbono deformados con geometría catenoidal solo representan una clase particular de sistemas cuánticos donde la dinámica de los portadores de carga (fermiones de espín $1/2$) se encuentra restringida en la superficie de un catenoide. Por lo que resulta lógico pensar en la existencia de otro material patrón distinto al grafeno, cuyos portadores de carga se encuentren caracterizados por cuasipartículas de espín diferente al de $1/2$. Este es el caso de la red de Lieb [21,22], la cual es una red cuadrada bidimensional

cuyo espectro a bajas energías no está representado únicamente por un cono de Dirac, sino que también contiene una banda de energía cero (plana) [24], causando que los portadores de carga no puedan ser descritos por fermiones de espín $1/2$, sino por bosones de espín 1. Respecto a su realización experimental, a pesar de que inicialmente el modelo de Lieb se utilizó para estudiar teóricamente la estructura electrónica (tridimensional) presente en los cupratos de alta temperatura [25], en los últimos años se ha logrado implementar esta red a sistemas electrónicos artificiales [26] y fotónicos [27], abriendo un nuevo camino a la investigación experimental de nuevos fenómenos cuánticos relacionados a la presencia de cuasipartículas de espín entero.

Asimismo, debido a que el modelo de Lieb es relativamente nuevo (la primera implementación se realizó en el año 2015 [25]), actualmente no se han reportado estudios teóricos ni realizaciones experimentales relacionados a nanotubos de carbono con geometría catenoidal en redes de Lieb. Por lo tanto, asumiendo que en el futuro estas estructuras puedan ser sintetizadas, el objetivo principal de este proyecto es proponer un modelo teórico basado en la implementación del espacio curvo de un catenoide para estudiar las propiedades electrónicas y topológicas de los nanotubos deformados con geometría catenoidal en redes de Lieb. Para lo cual, se demostrará que las deformaciones causadas por estas estructuras, en el régimen de bajas energías, pueden ser estudiadas a partir de un Hamiltoniano bidimensional tipo Dirac-Weyl inmerso en la superficie de un catenoide. En consecuencia, esto no solo afectará considerablemente a las propiedades electrónicas y topológicas de la red con respecto al caso plano, sino que también afectará a la dinámica de los portadores de carga (cuasipartículas de espín 1). Por consiguiente, este proyecto pretende destacar las ventajas o limitaciones de los nanotubos deformados con geometría catenoidal en redes de Lieb sobre sus homólogos convencionales construidos a partir de grafeno; además de contribuir, desde un enfoque teórico, a la implementación de sistemas electrónicos artificiales y fotónicos basados en la red de Lieb.

I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

1.1. Descripción de la realidad problemática

Desde su descubrimiento experimental en el año 2004 [28], el grafeno ha presentado una variedad de interesantes propiedades físicas [29] debido al comportamiento inusual de su estructura electrónica, la cual ha ocasionado que este material pueda utilizarse en la construcción de otras nanoestructuras más complejas con diferentes aplicaciones físicas, químicas y biológicas [30]. En ese sentido, entre una de las principales estructuras que utiliza como material padrón al grafeno, puede mencionarse a los denominados “nanotubos de carbono” [5,6], los cuales pueden ser construidos a través del enrollamiento de una o más láminas de grafeno, permitiendo así que estas estructuras puedan comportarse como aislantes o conductores según el tamaño de su diámetro y su geometría interna. Más aún, es necesario mencionar que en las últimas décadas se ha comprobado que las propiedades químicas y físicas de los nanotubos de carbono cambian radicalmente cuando estos son sometidas a diferentes tipos de deformaciones externas [31], por lo que recientemente gran parte de investigadores de todas las áreas se encuentran interesados en el estudio de las diferentes propiedades topológicas de estas estructuras [15,32].

En este punto, es importante recordar que debido a que la estructura interna de los nanotubos de carbono y sus diferentes formas alotrópicas están conformadas básicamente de grafeno [14-18], cuyas propiedades electrónicas pueden ser estudiadas a partir de la dinámica de cuasipartículas de espín $1/2$ representadas por el Hamiltoniano bidimensional de Dirac, permitiendo utilizar parte del formalismo matemático aplicado en la física de altas energías (teoría relativista de Dirac) para estudiar estructuras propias de la física de la materia condensada. No obstante, el grafeno no es el único material cuyos portadores de carga pueden ser representados por cuasipartículas relativistas, sino que también existe una clase particular de materiales que poseen portadores de carga con espín diferente al de $1/2$. En ese contexto, surge la red de Lieb [21-23], una red cuadrada y bidimensional conformada por átomos de oxígeno y cobre, cuya estructura de bandas no está representada únicamente por dos bandas energéticas (como el caso del grafeno), sino que adicionalmente posee una banda (plana) de energía cero [24]. Por lo tanto, los portadores de carga de esta red son descritos por bosones de espín 1 representados por un Hamiltoniano tipo Dirac-Weyl [33]. Sin embargo, debido a su recientemente implementación experimental en sistemas fotovoltaicos [25] y múltiples estudios sobre su estructura electrónica [34-36], las investigaciones relacionadas a nanoestructuras compuestas de esta red aún no han sido reportadas, especialmente las que involucran al estudio de nanotubos construidos con este material. Por tal motivo, considerando el rol fundamental que

han jugado los nanotubos de carbono y sus diferentes alótopos en la electrónica moderna (cables cuánticos y transistores [6, 37, 38]), resulta natural preguntarse qué nuevas propiedades electrónicas y topológicas presentarán estas estructuras construidas con redes de Lieb. En ese contexto, a pesar de la falta de información bibliográfica presente en este tipo de estudios, la presente investigación pretende dar una primera respuesta relacionada al descubrimiento de nuevas propiedades de transporte electrónico que podrían ocurrir en nanoestructuras cuyos portadores de carga están asociados a cuasipartículas de espín 1. Por tal motivo, en el presente proyecto se propondrá un modelo matemático basado en la implementación del espacio curvo de un catenoide en un Hamiltoniano tipo Dirac-Weyl para estudiar las propiedades electrónicas y topológicas presentes en una clase particular de nanotubos deformados en redes de Lieb.

1.2. Formulación del problema

1.2.1. Problema general

¿De qué manera se podría estudiar las propiedades electrónicas y topológicas de nanotubos deformados con geometría catenoidal en redes de Lieb?

1.2.2. Problemas específicos

- ¿Cuáles serán los efectos inducidos producidos por la deformación geométrica de la red sobre los estados electrónicos?
- ¿Qué tipo de propiedades electrónicas y topológicas se podrán calcular a partir del modelo matemático usado para describir deformaciones catenoidales en redes de Lieb?
- ¿Cómo serán modificadas las propiedades de transporte electrónico de los nanotubos deformados con geometría catenoidal en redes de Lieb cuando estos son sometidos a los efectos de un campo magnético externo?

1.3. Objetivos

1.3.1. Objetivo general

Proponer un formalismo matemático basado en la implementación del espacio curvo de un catenoide en el Hamiltoniano tipo Dirac-Weyl para poder estudiar las propiedades electrónicas y topológicas de nanotubos deformados con geometría catenoidal en redes de Lieb.

1.3.2. Objetivos específicos

- Obtener las ecuaciones dinámicas de los portadores de carga en la superficie del nanotubo deformado con geometría catenoidal y analizar su respectiva densidad electrónica.
- Describir las propiedades electrónicas y topológicas del sistema a partir del comportamiento cuántico (estados ligados o dispersión) de sus portadores de carga frente a los efectos inducidos por las deformaciones geométricas de la red.
- Introducir un vector cuadripotencial al Hamiltoniano de Lieb mediante el formalismo del acoplamiento mínimo para obtener las nuevas ecuaciones dinámicas de los portadores de carga y así analizar los cambios en la densidad local de estados en las estructuras catenoidales de Lieb.

1.4. Justificación

Debido al actual ritmo del avance tecnológico, los expertos han estimado que en las próximas décadas, la mitad del consumo anual energético mundial será causado únicamente por el desarrollo informático y computacional. Por lo que investigadores de las ciencias de los materiales se encuentran trabajando en el estudio y fabricación de nuevos dispositivos electrónicos que ayuden a reducir el consumo energético de las más recientes tecnologías informáticas [37]. En ese contexto, recientemente ha surgido una nueva área de investigación enfocada al estudio de las propiedades geométricas de estructuras bidimensionales, logrando aportar un sin fin de herramientas teóricas para la construcción e implementación de nanoestructuras electrónicas, tales como nanocintas [38] y nanotubos de carbono [5,6], que ayuden al mejoramiento del procesamiento informático.

De esta manera, tomando como referencia los estudios de las propiedades electrónicas y geométricas de estas nanoestructuras, especialmente las relacionadas al estudio de nanotubos de carbono deformados [14-18], el presente proyecto pretende estudiar los efectos físicos inducidos por la geometría de un nanotubo deformado con geometría catenoidal en redes de Lieb, donde se examinará los efectos subyacentes relacionados al transporte electrónico y propiedades topológicas de materiales cuyos portadores de carga se encuentran caracterizados por cuasipartículas de espín 1, destacando sus ventajas o limitaciones a los que estos materiales estarían sujetos sobre la electrónica convencional basadas en carbono. Así pues, este trabajo pretende contribuir, desde un enfoque teórico, a la implementación de sistemas electrónicos artificiales y fotónicos para reducir considerablemente el consumo de energía computacional en las recientes tecnologías de información.

1.5. Limitantes de la investigación

Limitante teórica

El presente proyecto de tesis pertenece a la línea de investigación principal de las Ciencias Naturales, específicamente a la línea de investigación secundaria de las Ciencias Físicas, donde se brindará mayor enfoque a aquellos tópicos relacionados al estudio de propiedades electrónicas de materiales bidimensionales pertenecientes a la disciplina de la Física de los Materiales. En ese contexto, una de las limitaciones teóricas presentadas en este proyecto gira entorno a la ausencia de referencias bibliográficas, a nivel nacional, de estudios teóricos sobre redes de Lieb, por lo que sólo se usarán referencias bibliográficas de grupos de investigación internacionales.

Limitante temporal

El cronograma de actividades para este proyecto se extiende por un periodo de 12 meses, en coherencia a la dificultad de los cálculos que serán realizados en virtud del cumplimiento de los objetivos propuestos. No obstante, es importante mencionar que el presente proyecto es una continuación de mis estudios de maestría, en ese sentido, existe la posibilidad de reducir el periodo de ejecución al establecido en el cronograma. Esto será definido e informado oportunamente por el profesor asesor.

Limitante espacial

Al ser un estudio teórico, y debido a la emergencia sanitaria por el COVID-19, el desarrollo del presente proyecto será efectuado en mi actual domicilio con supervisión remota de mi asesor y co asesor.

II. MARCO TEÓRICO

2.1. Antecedentes: Internacional y nacional

Internacional

J. González y J. Herrero (2010) [14] estudiaron las propiedades electrónicas de estructuras catenoidales en grafeno, en especial la que se encuentra formada por un nanotubo pequeño que actúa como puente entre dos láminas de grafeno. De esta manera, con esta aproximación, los autores desarrollaron una teoría efectiva de fermiones de Dirac en presencia de un campo *gauge* no abeliano para explicar las propiedades electrónicas a baja energía que

ocurren en estas estructuras, modelando los defectos geométricos de la red con campos *gauge* no abelianos en la ecuación de Dirac. Con este modelo, los autores encuentran una correspondencia entre el número de estados electrónicos localizados y el flujo del campo *gauge* efectivo en la estructura, lo cual muestra que los nanotubos deformados poseen una excelente estabilidad estructural y en consecuencia estos pueden ser realizados experimentalmente. Este trabajo se relaciona con la presente investigación como una de las principales fuentes bibliográficas donde se utiliza una teoría de fermiones para modelar las deformaciones geométricas en una estructura gráfica. Dicho de otro modo, a pesar que el trabajo de J. Gonzales y J. Herrero se basa principalmente en la red deformada de grafeno, sus resultados muestran que es posible utilizar la ecuación relativista de Dirac inmerso en un flujo magnético para describir los efectos que sienten los portadores de carga (cuasipartículas de espín $1/2$) en nanotubos deformados. Así pues, considerando el hecho que la red de Lieb también puede ser estudiada con una teoría cuántica asociada a cuasipartículas de espín 1, es posible tomar parte de este formalismo matemático para proponer un Hamiltoniano tipo Dirac-Weyl para estudiar las propiedades de transporte electrónico en nanotubos deformados con geometría catenoidal en redes de Lieb.

A. Iorio y G. Lambiase [32] (2014) presentan las bases teóricas para estudiar las deformaciones geométricas ocurridas en el grafeno a partir de una teoría cuántica de campos en espacios curvos. De esta manera, los autores proporcionan una explicación detallada sobre las principales características de los espacios-tiempos curvos, haciendo énfasis sobre la estrecha relación de la velocidad de la luz c en una teoría cuántica de campos y el espaciado de red en materiales bidimensionales como el grafeno. Asimismo, los autores también estudian la estructura electrónica deformada del grafeno en el contexto de una familia de superficies conocidas como “pseudo esferas de Beltrami” (espacio-tiempo curvo de Lobachevsky), las cuales poseen la particularidad de tener una curvatura constante negativa. Este trabajo, a pesar de estar relacionado a otro material bidimensional como es el grafeno, se relaciona con la presente investigación desde el punto de vista conceptual. Es decir, gracias a estos interesantes resultados, es posible hacer una extrapolación del uso de un espacio-tiempo curvo en el Hamiltoniano tipo Dirac-Weyl para estudiar los diferentes tipos de deformaciones geométricas en la red de Lieb, en especial a aquellos relacionados a geometrías que poseen curvatura gaussiana negativa, como es el caso de la geometría catenoidal.

S. Mukherjee et al. [24] (2015) realizaron por primera vez una implementación experimental de la red de Lieb (con una distancia entre sus átomos de 24 a 48 μm) en un chip de vidrio de 7 cm de largo. Ellos utilizaron una técnica de escritura directa con láser de

femtosegundos para diseñar una red fotónica con tres bandas de energía (incluida una banda media perfectamente plana), donde lograron analizar (teóricamente y experimentalmente) específicamente la evolución de los estados electrónicos en la banda plana de la red, mostrando que estas bandas presentan potenciales aplicaciones en nuevas tecnologías relacionadas a la simulación cuántica en un entorno altamente controlable. Este trabajo se relaciona con la presente investigación, ya que muestra que tan reciente es el estudio experimental y teórico de la red de Lieb, haciendo énfasis en sus potenciales aplicaciones tecnológicas que esta podría presentar. De esta manera, debido a que los nanotubos de Lieb presentan deformaciones en su estructura interna, es posible inferir que los resultados de S. Mukherjee et al. (2015) puedan contribuir a un posible escenario experimental donde los nanotubos deformados con geometría catenoidal en redes de Lieb desempeñen un papel crucial los próximos dispositivos electrónicos de última generación.

D. Gouveia et al. [36] (2016) estudiaron la evolución temporal de estados localizados pertenecientes a la red de Lieb cuando esta se encuentra sometida a los efectos de un flujo magnético perpendicular al sistema inicial. Como consecuencia, los conos de Dirac de la estructura electrónica de Lieb tocan periódicamente la banda plana conforme la intensidad del flujo magnético aumenta. Asimismo, los autores demuestran que la lenta evolución temporal de los estados localizados puede entenderse como si fuese un movimiento de precesión clásico, donde un estado evolutivo de la red de Lieb puede precesar entorno de otro estado con una amplitud que oscila al rededor de un valor constante, excepto cuando el flujo magnético varía intempestivamente. De esta manera, este comportamiento inusual, es interpretado por los autores como indicios de un campo eléctrico generado por un campo magnético dependiente del tiempo que rompe la simetría rotacional C_4 del Hamiltoniano de Lieb. Este trabajo se relaciona con la presente investigación, ya que muestra uno de los principales estudios asociados a las propiedades electrónicas de la red de Lieb inmersa en un flujo magnético externo. Así pues, el trabajo de D. Gouveia et al. (2016) proporciona una primera idea sobre el origen de la evolución de los estados electrónicos localizados en el material. Esto será aprovechado en la segunda parte de la presente investigación, específicamente cuando se necesite analizar los cambios en las propiedades topológicas y electrónicas de un nanotubo de Lieb deformado con una geometría catenoidal en presencia de un campo magnético externo. Asimismo, esta referencia jugará un rol principal en el entendimiento de la aparición de estados confinantes (estados de Landau) en la superficie de la estructura del nanotubo.

N. Menezes et al. [23] (2018) demostraron que si es considerado una fase topológica (fase de Varma) en el modelo de enlace fuerte para el Hamiltoniano de Lieb, si entonces surge

un gap de energía en dicho sistema. Como consecuencia, la nueva teoría efectiva puede ser tratada como un Hamiltoniano tipo Duffin-Kemmer-Petiau (DKP) para cuasipartículas de espín 0. Así mismo, los autores, con ayuda del propagador de la teoría DKP, calcularon la conductividad Hall en ese sistema, obteniendo un valor al que ellas denominan de “no convencional”. No obstante, en el año 2020, el equipo de A. Obispo et al. [21], logró mostrar que los portadores de carga en la red de Lieb, independientemente de una fase de Varma, se encuentran asociados a cuasipartículas de espín 1. Por lo que, el resultado “inesperado” obtenido por N. Menezes et al. (2018) es debido a una mala interpretación de la naturaleza de los portadores de carga, llevando al cálculo errado del tensor de polarización de la teoría DKP y que el resultado correcto está en absoluta concordancia con aquellos obtenidos vía otros métodos de cálculo, concluyendo así que los resultados son completamente errados. Este trabajo se relaciona con la investigación en curso, ya que muestra que la naturaleza de los portadores de carga en la red de Lieb, independientemente de alguna interacción externa, se encuentra asociada a cuasipartículas de espín 1. Este resultado será de gran ayuda al momento de escoger los invariantes de Lorentz del Hamiltoniano tipo Dirac-Weyl y así construir una teoría donde pueda describirse deformaciones geométricas (espacios curvos) en la red de Lieb. Asimismo, el hecho de que las propiedades de transporte (conductividad de Hall) en redes de Lieb puedan obtenerse de diferentes maneras y estas puedan ser comprobadas en la literatura científica, brinda una solidez a las propiedades electrónicas y topológicas que se estudiarán en la presente investigación.

Nacional

Actualmente no hay un registro nacional de investigaciones relacionadas al estudio de propiedades electrónicas y topológicas en redes de Lieb ni estructuras formadas con esta red.

2.2. Bases teóricas

2.2.1. Nanotubos de carbono deformados con geometría catenoidal

Las propiedades de transporte electrónico en nanotubos de carbono han jugado un rol muy importante en la fabricación de circuitos electrónicos basados en la unión intermolecular [39] de diferentes nanotubos (ver Fig. 1), los cuales serían capaces de reemplazar a sus homólogos construidos con Silicio y otros metales conductores [40]. En ese contexto, se ha mostrado experimentalmente que cuando es llevado con éxito estas uniones intramoleculares aparecen una serie de nuevas propiedades topológicas capaces de modificar las

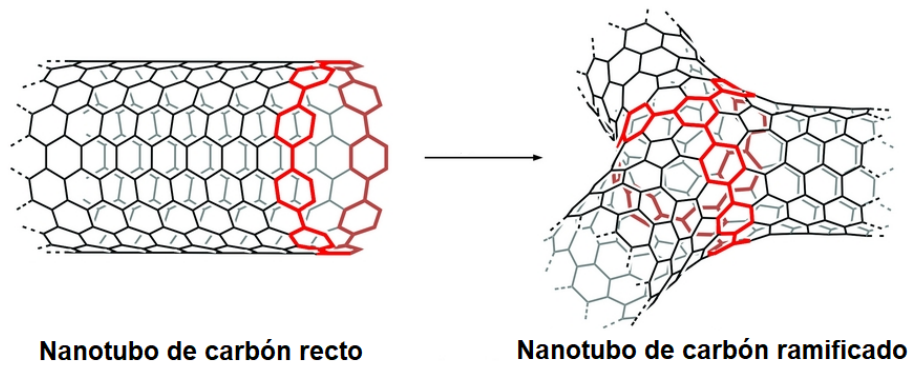


Figura 1: Representación de un nanotubo ramificado construido mediante la unión de nanotubos rectos [39].

propiedades electrónicas de los nanotubos [41,42]. Por tal motivo, distintos investigadores han mostrado su interés en el estudio teórico de diferentes tipos de estructuras formadas bajo la deformación de nanotubos [43], entre los más importantes se puede mencionar a los nanotubos con deformación catenoidal [14-18], los cuales se muestran en la Fig 2.

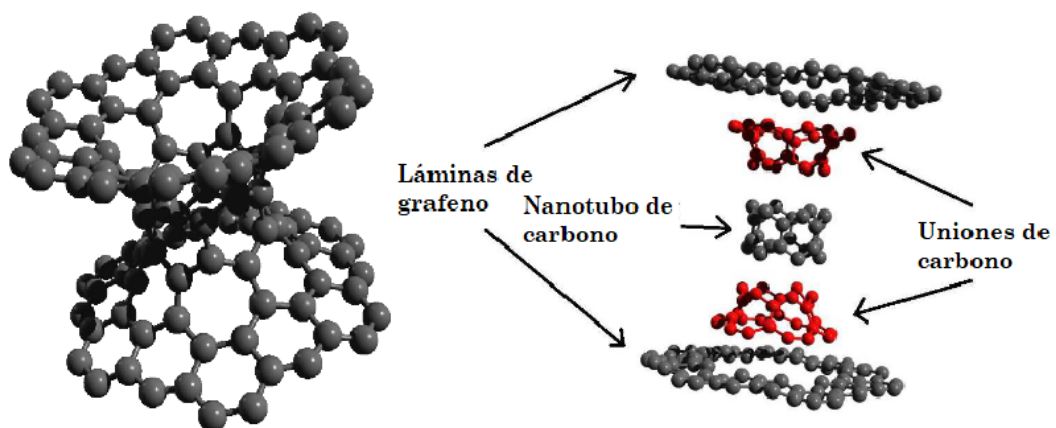


Figura 2: Nanotubo de carbono con deformación catenoidal [20].

Estas estructuras, llamadas así por su similitud con la superficie de un catenoide, pueden ser construidas a través del siguiente procedimiento (ver Fig. 3). Primero se realiza un agujero en forma hexagonal a una lámina de grafeno (Fig. 3.10 (a)). Luego, se unen nuevos enlaces verticales a los átomos que se encuentran en el límite del agujero (Fig. 3.10 (b)). Por último, se conecta el nanotubo de carbono en los enlaces verticales puestos en la lámina de grafeno (Fig. 3.10 (c)) [14].

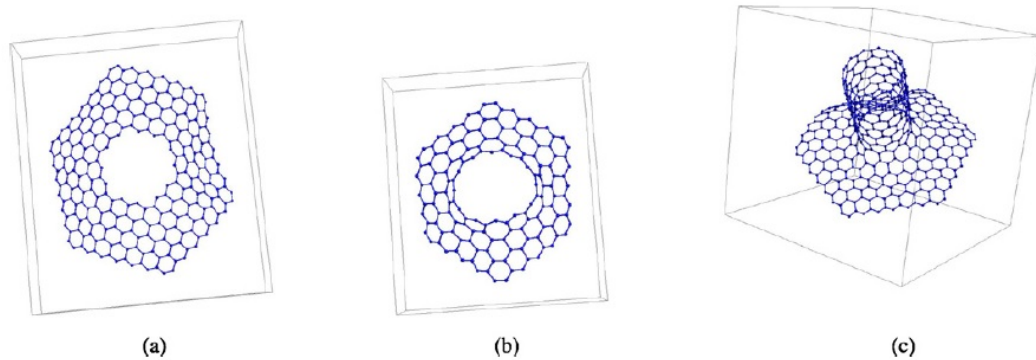


Figura 3: Método de construcción de un nanotubo de carbono con deformación catenoidal [14].

Un punto importante a mencionar, es que debido a los efectos de la curvatura que se encuentra a lo largo del nanotubo de carbono usado como conexión, la distancia entre los átomos de carbono en las láminas de grafeno cambia. Como consecuencia, los orbitales p_z son rotados y los enlaces π y σ son hibridados de nuevo, de forma análoga al procedimiento que ocurre en las uniones tipo $p-n$ [20]. Debido a estas singulares propiedades electrónicas en este nanotubo deformado, se han estudiado otras propiedades físicas relacionadas a su conductividad [15,16,18] y almacenamiento de carga eléctrica [17]. En ese sentido, uno de los mayores aportes respecto a las propiedades físicas de estas estructuras fue aportado por O. Katanaev y V. Volovich [44,45], quienes mostraron que es posible modelar y estudiar los defectos (disclinaciones) continuos presentes en la superficie de estructuras gráficas a través de la teoría geométrica de Riemann-Cartan y la física de altas energías. Por este motivo, es posible usar la ecuación relativista de Dirac en el contexto geométrico de un catenoide como un modelo matemático para describir las propiedades de transporte en un nanotubo de carbono deformado con geometría catenoidal.

2.2.2. Nanotubos deformados con geometría catenoidal en redes de Lieb

A pesar que los nanotubos deformados con geometría catenoidal en redes de Lieb aún no han logrado ser sintetizados experimentalmente ni estudiados teóricamente, siguiendo los resultados obtenidos con el grafeno [1,2], es posible esperar que las muestras de Lieb

también exhiban una tendencia natural a presentar regiones con curvatura en su geometría bidimensional. Por lo cual, es necesario describir la importancia que tienen estos defectos (curvatura y torsión) al estudiar las propiedades electrónicas en la red de Lieb. En ese contexto, es necesario desarrollar un modelo matemático donde se incluyan los efectos geométricos en la dinámica de las cuasipartículas de espín 1 que surgen cuando la red de Lieb posee una deformación catenoidal.

De este modo, para describir la dinámica de cuasipartículas de espín 1 en un espacio curvo, es necesario que el espinor de Dirac-Weyl y su derivada contengan información geométrica del sistema, lo cual es posible siempre que se considere el “principio de covariancia”. Por lo cual, para que las magnitudes escalares y vectoriales de un sistema plano sean transformadas por sus homólogos en espacio curvo, éstas deben satisfacer un conjunto de transformaciones de coordenadas llamadas “transformaciones de Lorentz”. Sin embargo, no es posible realizar este tipo de transformaciones con aquellas estructuras que se comportan como espinores, por lo que es necesario introducir nuevas herramientas matemáticas para describir correctamente espinores en espacios curvos. En ese sentido, el formalismo de las tétradas surge como una alternativa para resolver este inconveniente. Así pues, este método, apoyado en el “principio de equivalencia”, propone definir un conjunto de vectores asociados a un sistema localmente plano en cada punto de una superficie curva. Por lo cual, cualquier vector A_μ en un espacio curvo puede expresarse de la siguiente manera

$$A_\mu = e^{(a)}{}_\mu A_{(a)}, \quad (1)$$

donde la matriz $e^{(a)}{}_\mu$ es definida como la tétrada de transformación que permite expresar un vector en un espacio curvo A_μ en función de su homólogo $A_{(a)}$ definido en un espacio localmente plano. Así mismo, es importante mencionar que los índices griegos μ y latinos (a) dependen del número de dimensiones del sistema. Por tanto, debido a que la dinámica de los portadores de carga se encuentra en un sistema bidimensional, los valores que toman los subíndices son $\mu = 0, 1, 2$ y $(a) = 0, 1, 2$.

Por otra parte, definiendo la inversa de la tétrada $e^{(a)}{}_\mu$ como $e_{(a)}{}^\mu$, es posible escribir las siguientes relaciones

$$e^{(a)}{}_\mu e_{(a)}{}^\nu = \delta_\mu^\nu, \quad e_{(a)}{}^\mu e_{(b)}{}^\nu = \delta_{(b)}^{(a)}, \quad (2)$$

donde δ_ν^μ y $\delta_{(b)}^{(a)}$ son las deltas de Kronecker para un sistema curvo y plano, respectivamente. En consecuencia, combinando las ecuaciones (2) y (1), se tiene

$$A_{(a)} = e_{(a)}{}^\mu A_\mu. \quad (3)$$

En este punto, cabe señalar que los índices griegos son “subidos y bajados” mediante el tensor métrico $g_{\mu\nu}$ del espacio curvo

$$e_{(a)\mu} = g_{\mu\nu} e_{(a)}{}^\nu, \quad e_{(a)}{}^\nu = g^{\mu\nu} e_{(a)\mu}, \quad (4)$$

mientras que los índices latinos son “subidos y bajados” por el tensor métrico de Minkowski $\eta_{(a)(b)}$

$$e_{(a)}{}^\mu = \eta_{(a)(b)} e^{(b)\mu}, \quad e^{(a)\mu} = \eta^{(a)(b)} e_{(b)}{}^\mu, \quad (5)$$

con lo cual se puede demostrar las siguientes relaciones adicionales

$$g_{\mu\nu} e_{(a)}{}^\mu e_{(b)}{}^\nu = \eta_{(a)(b)}, \quad e_{(a)}{}^\mu e_{(b)\mu} \eta_{(a)(b)} = g_{\mu\nu}. \quad (6)$$

De esta manera, se ha demostrado que es posible estudiar estructuras tensoriales definidas en un espacio curvo a partir de sus homólogos en el espacio plano. Sin embargo, para describir la ecuación de Dirac en espacios curvos, es necesario imponer que la derivada de un espinor se transforme bajo transformaciones de Lorentz como un espinor. Por lo cual, escogiendo adecuadamente la derivada en espacios curvos que cumpla con estos requerimientos [46], se tiene

$$\nabla_\mu \psi = \partial_\mu \psi + \Omega_\mu \psi, \quad (7)$$

donde Ω_μ es la conexión afín para partículas de espín 1 definida como [47]

$$\Omega_\mu = -\frac{1}{2} \omega_{\mu(a)(b)} [S^{(a)}, S^{(b)}], \quad (8)$$

la conexión espín $\omega_{\mu(a)(b)}$ es dada por

$$\omega_{\mu(a)(b)} = e_{(a)\nu} e_{(b)}{}^\tau \Gamma_{\tau\mu}^\nu - e_{(b)}{}^\tau \partial_\mu e_{(a)\tau}, \quad \omega_{\mu(a)(b)} = -\omega_{\mu(b)(a)}, \quad (9)$$

y los símbolos de Christoffel $\Gamma_{\tau\mu}^\nu$ son expresados como

$$\Gamma_{\mu\tau}^\nu = \frac{g^{\nu\rho}}{2} \left(\partial_\mu g_{\rho\tau} + \partial_\tau g_{\rho\mu} - \partial_\rho g_{\mu\tau} \right). \quad (10)$$

Con esto, finalmente se han definido las herramientas necesarias para poder generalizar el

Hamiltoniano de Lieb [21-23] en espacios curvos, obteniendo

$$\mathcal{H} = -iS^j \nabla_j, \quad (11)$$

donde la derivada covariante es $\nabla_j = \partial_j + \Omega_j$ con $j = 1, 2$, las matrices S^j son dadas por $S^j = e_{(a)}{}^\mu S^{(j)}$, y las matrices $S^{(j)}$ en el espacio plano son definidas como

$$S^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Como se puede notar en la ecuación (11), tanto las matrices S^j como la derivada ∇_j contienen información geométrica de un espacio-tiempo curvo arbitrario, por lo cual es posible introducir la geometría de un catenoide expresada en la siguiente parametrización en \mathbb{R}^3

$$\vec{r} = \sqrt{R^2 + \nu^2} \left(\cos \varphi \hat{i} + \sin \varphi \hat{j} \right) + R \operatorname{arcsinh} \left(\frac{\nu}{R} \right) \hat{k}, \quad (13)$$

donde R es un radio mínimo, la coordenada angular es $\varphi \in [0, 2\pi]$ y la coordenada meridional es $\nu \in \langle -\infty, \infty \rangle$, como puede verse en la Fig.4.

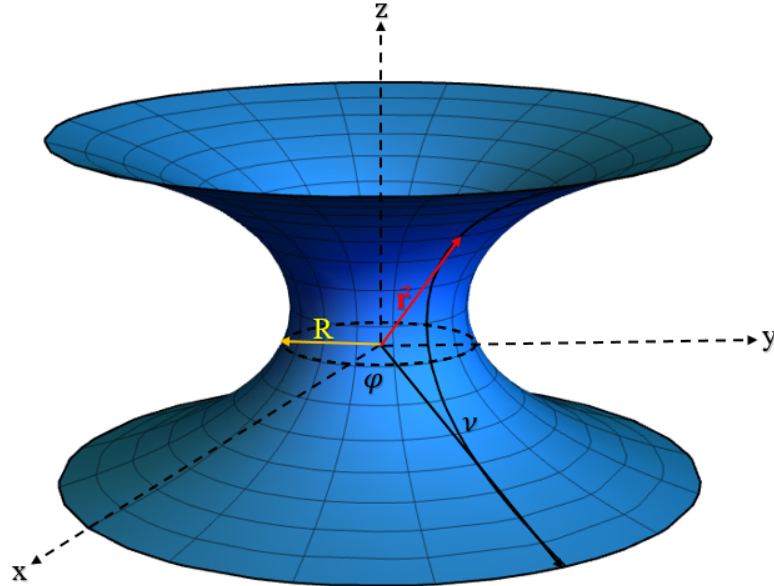


Figura 4: Representación esquemática del catenoide. Elaboración propia.

Por otro lado, con ayuda de (13), es posible definir el siguiente elemento de línea en 2 + 1 dimensiones asociado a la geometría del catenoide

$$ds^2 = dt^2 - d\nu^2 - (\nu^2 + R^2)d\varphi^2, \quad (14)$$

cuyas tétradas pueden ser expresadas como

$$e_{(a)}{}^\mu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & (R^2 + \nu^2)^{-1/2} \end{pmatrix}, \quad e_{(a)\mu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -(R^2 + \nu^2)^{1/2} \end{pmatrix}, \quad (15)$$

y los símbolos de Christoffel no nulos asociados a (14) son dados por

$$\Gamma_{\varphi\varphi}^\nu = -\nu, \quad (16)$$

$$\Gamma_{\varphi\nu}^\varphi = \Gamma_{\nu\varphi}^\varphi = \frac{l}{(R^2 + \nu^2)}. \quad (17)$$

Como consecuencia, con ayuda de (15), las matrices S^μ en el espacio curvo de un catenoide son definidas como

$$S^\nu = S^{(1)}, \quad S^\varphi = \frac{S^{(2)}}{\sqrt{R^2 + \nu^2}}, \quad (18)$$

y la conexión afín es dada por

$$\Omega_\varphi = -\frac{\nu}{(R^2 + \nu^2)^{1/2}}[S^{(1)}, S^{(2)}]. \quad (19)$$

De este modo, la derivada covariante es definida como

$$\begin{aligned} \nabla_\nu &= \partial_\nu, \\ \nabla_\varphi &= \partial_\varphi - \frac{\nu}{(R^2 + \nu^2)^{1/2}}[S^{(1)}, S^{(2)}]. \end{aligned} \quad (20)$$

tal que, substituyendo las derivadas covariantes (20) junto con las matrices S^μ (18) en el Hamiltoniano curvo de Lieb (11), se tiene

$$H\Phi = -i1S^{(1)}\partial_\nu\Phi - i\frac{S^{(2)}}{\sqrt{R^2 + \nu^2}}\left(\partial_\varphi - \frac{\nu}{\sqrt{R^2 + \nu^2}}[S^{(1)}, S^{(2)}]\right)\Phi. \quad (21)$$

De esta manera, con el Hamiltoniano (21), es posible estudiar las propiedades de transporte electrónico en nanotubos de Lieb deformados con geometría catenoidal.

2.3. Conceptual

2.3.1. Estructura electrónica de la red de Lieb

Para obtener la estructura de bandas asociada a la red Lieb, es importante considerar la dinámica de sus electrones en torno a los átomos de cobre y oxígeno que se encuentran etiquetadas como a , b y c en la Fig 5. En ese sentido, el modelo del enlace fuerte, basado en el formalismo de la segunda cuantización, propone el siguiente Hamiltoniano para describir los saltos electrónicos en los orbitales p_x , $d_{x^2-y^2}$ y p_y

$$H = -\tau_1 \sum_{j=0}^n \left[\left(a_j^\dagger b_j + b_j^\dagger c_j \right) - \left(a_j^\dagger b_{j+\hat{x}} + b_j^\dagger c_{j+\hat{y}} \right) + H.c. \right], \quad (22)$$

donde el parámetro τ_1 representa a la energía de salto del electrón a sus primeros vecinos, la abreviatura $H.c.$ se refiere al conjugado hermítico de los dos primeros términos de (22) y el índice j indica la posición del electrón en la red, la cual se ha considerado por conveniencia que tenga una distancia igual a la unidad entre sus átomos, donde se cumple que $\hat{x} = (1, 0)$, $\hat{y} = (0, 1)$.

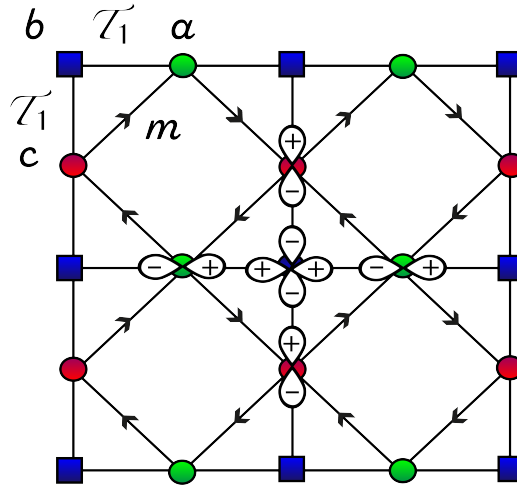


Figura 5: Dibujo esquemático de una red bidimensional de Lieb [23].

Por otro lado, los sitios a , b y c (a^\dagger, b^\dagger y c^\dagger) son interpretados como operadores de aniquilación (creación) cuyas transformadas de Fourier están dados por

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^m e^{ik \cdot j} a_k, \quad (23)$$

tal que substituyendo (23) en (22), el Hamiltoniano es reescrito como

$$H = \sum_{k=0}^m \left[\Phi_1 a_k^\dagger b_k + \Phi_2 b_k^\dagger c_k + \Phi_1^* b_k^\dagger a_k + \Phi_2^* c_k^\dagger b_k \right], \quad (24)$$

donde los factores de estructura Φ_1 y Φ_2 son definidos por

$$\Phi_1 = -\tau_1(1 - e^{ik_x}), \quad \Phi_2 = -\tau_1(1 - e^{ik_y}). \quad (25)$$

No obstante, ordenando los términos de (25), es evidente que el Hamiltoniano puede ser escrito en una notación matricial de la siguiente manera

$$H = \sum_{k=0}^m \begin{pmatrix} b_k^\dagger & a_k^\dagger & c_k^\dagger \end{pmatrix} \mathcal{H}(k) \begin{pmatrix} b_k \\ a_k \\ c_k \end{pmatrix}, \quad (26)$$

donde $\mathcal{H}(k)$ es dado por la siguiente matriz 3×3

$$\mathcal{H}(k) = \begin{pmatrix} 0 & \Phi_1^* & \Phi_2 \\ \Phi_1 & 0 & 0 \\ \Phi_2^* & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (27)$$

Por lo tanto, las bandas de energías son representadas por los autovalores de $\mathcal{H}(k)$, tal que diagonalizando se obtiene la siguiente expresión

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \sqrt{\Phi_1^2 + \Phi_2^2} = \pm \tau_1 \sqrt{4 - 2 \cos(k_x) - 2 \cos(k_y)}, \quad (28)$$

$$E_0(\mathbf{k}) = 0.$$

Así pues, la expresión (28) describe la energía de los electrones en la banda de conducción (banda superior) $E_+(\mathbf{k})$, en la banda de valencia (banda inferior) $E_-(\mathbf{k})$ y en la banda plana (banda del medio) $E_0(\mathbf{k})$ para la red de Lieb, las cuales se encuentran ilustradas en la Fig. 6. De esta forma, como se puede observar, la red de Lieb tiene una estructura electrónica única en el régimen de bajas energías, en el que una banda plana de energía cero está emparedada por otra dos bandas (conocidas como conos de Dirac) que coinciden en un punto en común perteneciente a la primera zona de Brillouin del espacio recíproco. Para encontrar dichos puntos, es necesario analizar los valores máximos y mínimos de la expresión (28), tal que

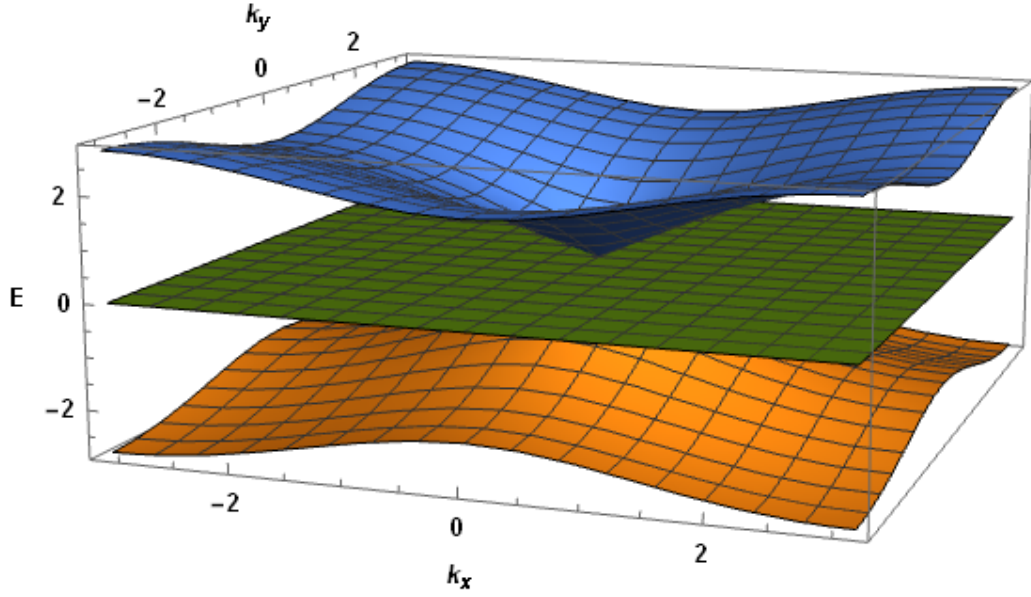


Figura 6: Estructura de bandas de la red de Lieb obtenida de la solución (28) para $k_x \in [-2, 2]$ y $k_y \in [-2, 2]$. Elaboración propia.

$$\frac{\partial}{\partial k_x} E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \tau_1 \frac{2 \sin(k_x)}{\sqrt{4 - 2 \cos(k_x) - 2 \cos(k_y)}} = 0, \quad (29)$$

$$\frac{\partial}{\partial k_y} E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \tau_1 \frac{2 \sin(k_y)}{\sqrt{4 - 2 \cos(k_x) - 2 \cos(k_y)}} = 0. \quad (30)$$

Resolviendo estas ecuaciones, se puede mostrar que la banda de conducción y valencia, junto con la banda plana, coinciden para el valor particular de $\mathbf{k}_{\pm,0} = (0, 0)$. Por lo cual, de manera análoga que el grafeno, estos puntos donde $E(\mathbf{k}_{\pm,0}) = 0$, son llamados “puntos de Dirac” y es donde ocurren las excitaciones electrónicas a bajas energías en la red de Lieb. De este modo, es posible realizar la siguiente aproximación en (25) entorno a estos puntos

$$\Phi_1 \approx i\tau_1 k_x, \quad \Phi_2 \approx i\tau_1 k_y, \quad (31)$$

tal que reemplazando (31) en el Hamiltoniano (24) y realizado posteriormente una transformación inversa de Fourier, resulta

$$H = \int \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \mathcal{H}(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}^2, \quad (32)$$

donde el espinor ha sido definido como $\Psi(\mathbf{r}) = \left(\psi^b(\mathbf{r}) \quad \psi^a(\mathbf{r}) \quad \psi^c(\mathbf{r}) \right)^T$ y $\mathcal{H}(\mathbf{r})$ es dado por

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}) = -i\tau_1 S^{(j)} \partial_j, \quad (33)$$

donde ∂_j es la derivada usual y las matrices $S^{(j)}$ son definidas como

$$S^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (34)$$

las cuales satisfacen el álgebra de Lie

$$[S^i, S^j] = i\epsilon^{ijk} S_k, \quad (35)$$

donde es posible definir una tercera matriz expresada como

$$S^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix}. \quad (36)$$

Por tanto, debido a que las matrices S^j satisfacen el álgebra (35), y estas poseen generadores infinitesimales del grupo unitario especial $SU(3)$ (Matrices de Gell-Mann) [48], se concluye que las excitaciones bidimensionales causadas por las tres especies fermiónicas en la red de Lieb, a bajas energías, pueden ser interpretadas como cuasipartículas (portadores de carga sin masa) de espín 1 que satisfacen un Hamiltoniano tipo Dirac-Weyl (33).

2.4. Definición de términos básicos

- Portadores de carga: Partículas virtuales que pueden desplazarse libremente por la red cristalina que surgen para entender la dinámica de los electrones que se encuentran en la banda de valencia y saltan hacia la banda de conducción, dejando un estado energético vacío denominado “hueco”.
- Cono de Dirac: Características que ocurren en algunas estructuras de bandas electrónicas en materiales bidimensionales (grafeno y aislantes topológicos), donde la banda de valencia y la banda de conducción toman la forma de las mitades superior e inferior de una superficie cónica. Como resultado de esto, las propiedades elec-

trónicas del material pueden describirse mediante el movimiento de los portadores de carga.

- Hamiltoniano en la aproximación de enlace fuerte: Modelo matemático que considera a los sólidos como un conjunto de átomos neutros que interactúan débilmente. Esto justificado en el hecho de que en la mayoría de sólidos, cuyos átomos tienen potenciales relativamente grandes, los electrones se encuentran ligados a los núcleos. Por lo cual, el estado electrónico en el cristal es parecido a su estado aislado o neutro. Permitiendo que se pueda utilizar teoría de perturbaciones, considerando al Hamiltoniano del cristal como el Hamiltoniano atómico más un término perturbativo para calcular dichos estados.
- Proceso Volterra: Formalismo teórico que consiste en el “corte y pegado” de una sección angular del material para la construcción de un defecto local cónico o hiperbólico. Así mismo, con este formalismo también es posible construir defectos globales como los observados en los fullerenos.

III. HIPÓTESIS Y VARIABLES

3.1. Hipótesis

3.1.1. Hipótesis generales

Las propiedades electrónicas y topológicas de un nanotubo deformado con geometría catenoidal en redes de Lieb son estudiados mediante la resolución analítica de las ecuaciones dinámicas provenientes del Hamiltoniano tipo Dirac-Weyl en el espacio-tiempo de un catenoide.

3.1.2. Hipótesis específicas

- El potencial inducido por la deformación geométrica es de naturaleza repulsiva, por lo que la densidad de estados electrónicos en la región media del nanotubo deformado es mínima, mientras que la concentración electrónica en los bordes de la estructura es máxima.
- La densidad de estados electrónicos en un nanotubo deformado con geometría catenoidal no es uniforme, lo que significa que la superficie de esta estructura presenta una mayor facilidad al paso de corriente eléctrica en las regiones donde hay una menor densidad de estados. Asimismo, debido a que la superficie del catenoide es

inversamente proporcional a su radio mínimo, cuando este toma valores muy pequeños, la estructura presentará una resistencia máxima al paso de corriente eléctrica.

- La densidad de estados electrónicos en un nanotubo deformado es confinada en las regiones cercanas al eje de simetría debido a la acción del campo magnético externo. Esto produce que los portadores de carga experimenten una cuantización de Landau, la cual es responsable de pequeñas oscilaciones en las propiedades de conductancia del material en función de la intensidad del campo magnético.

3.2. Definición conceptual de variables

3.2.1. Operacionalización de variables

Variable Dependiente	Dimensiones	Indicadores
Propiedades electrónicas y topológicas.	Dinámica de los electrones en la superficie de la estructura.	- Densidad local de estados. - Niveles de Landau. - Conductancia.
Variable Independiente	Dimensiones	Indicadores
Nanotubos deformados con geometría catenoidal en redes de Lieb.	Comportamiento de los portadores de carga en el potencial inducido por la geometría del sistema.	- Coeficiente de transmisión. - Estados ligados.

IV. DISEÑO METODOLÓGICO

4.1. Tipo y diseño de investigación

El presente proyecto de tesis pertenece al tipo de investigación aplicada, debido a que sus objetivos buscan contribuir con el estudio de nuevos dispositivos electrónicos basados en nanotubos deformados con geometría catenoidal en redes de Lieb.

Respecto al diseño de investigación, el presente proyecto posee un diseño teórico, debido a que se pretende usar un formalismo matemático basado en la implementación del espacio curvo de un catenoide en el Hamiltoniano tipo Dirac-Weyl para estudiar las propiedades electrónicas y topológicas de nanotubos deformados con geometría catenoidal en redes de Lieb.

4.2. Método de investigación

El método de investigación que se realizará en el presente proyecto está especificado en el siguiente conjunto de pasos brindados a continuación:

- Implementar la información geométrica del elemento de línea de un catenoide al Hamiltoniano de Lieb a través del formalismo de las tétradas.
- Resolver las ecuaciones matriciales provenientes del Hamiltoniano tipo curvo de Lieb para obtener un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden asociadas al comportamiento dinámico de los portadores de carga (cuasipartículas de espín 1)
- Utilizar el método de separación de variables para expresar las ecuaciones dinámicas de los portadores de carga como ecuaciones tipo Schrödinger, donde se analizará un potencial inducido puramente por la deformación geométrica del sistema.
- Resolver analíticamente las ecuaciones dinámicas de los portadores de carga para obtener las respectivas autofunciones del sistema, con las cuales se estudiará la densidad local de estados junto con las propiedades electrónicas y topológicas del sistema.
- Resolver analíticamente las ecuaciones dinámicas modificadas por la presencia de un campo magnético externo, el cual será introducido a través de un acoplamiento mínimo al Hamiltoniano curvo de Lieb para estudiar las nuevas propiedades de transporte de los nanotubos deformados con geometría catenoidal.

4.3. Población y muestra

Debido a la naturaleza de esta investigación, no se identifica población y muestra estadística.

4.4. Lugar de estudio

El lugar de estudio donde se realizará el presente proyecto es mi actual domicilio con supervisión remota de mi asesor y co asesor.

4.5. Técnicas e instrumentos para la recolección de la información.

El presente proyecto usará las siguientes teorías para la recolección de información: Teoría de enlace fuerte, Teoría de Dirac-Weyl, Teoría de espacios curvos en ecuaciones relativistas, Densidad local de estados y Niveles de Landau.

4.6. Análisis y procesamiento de datos

La teoría de densidad local de estados, a través de la solución de las ecuaciones dinámicas provenientes del Hamiltoniano de Dirac-Weyl curvo, permitirán estudiar la concentración de estados electrónicos distribuidos en la superficie del nanotubo deformado con geometría catenoidal en redes de Lieb y así estudiar sus propiedades electrónicas y topológicas. Por tal motivo, las herramientas matemáticas para encontrar la expresión analítica de estas ecuaciones dinámicas son las funciones modificadas de Mathieu y las funciones confluentes de Heun.

V. CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES

Actividades	Meses											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Desacoplar el sistema de ecuaciones resultantes del Hamiltoniano curvo de Lieb.	X											
Analizar los efectos físicos inducidos por la deformación geométrica de la red sobre los estados electrónicos.			X	X								
Resolver la ecuación resultante del Hamiltoniano curvo de Lieb con las funciones elípticas de Jacobi.					X							
Construir la expresión matemática de la densidad local de estados y analizar su comportamiento.						X	X					
Introducir un campo magnético a la teoría efectiva y resolver el sistema con las funciones de Heun.								X				
Construir la nueva densidad local de estados y analizar las nuevas propiedades electrónicas.									X	X		
Redacción final y presentación de la tesis.											X	X

VI. PRESUPUESTO

Actividades	Meses											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Servicios de internet.	S/120	S/120	S/120	S/120	S/120	S/120	S/120	S/120	S/120	S/120	S/120	S/120
Impresión de artículos.	S/20	—	S/20	—	S/20	—	S/20	—	S/20	—	—	—
Impresión y empastado de la tesis.	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	S/.100
TOTAL.	S/1640											

VII. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Cortijo, A., Vozmediano, M. A. (2007). Effects of topological defects and local curvature on the electronic properties of planar graphene. *Nuclear Physics B*, 763(3), 293-308.
- [2] Cortijo, A., Ferreirós, Y., Landsteiner, K., Vozmediano, M. A. (2015). Elastic gauge fields in Weyl semimetals. *Physical review letters*, 115(17), 177202.
- [3] Cortijo, A., Vozmediano, M. A. (2007). Electronic properties of curved graphene sheets. *EPL (Europhysics Letters)*, 77(4), 47002
- [4] Gonzalez, J., Guinea, F., Vozmediano, M. A. (1993). The electronic spectrum of fullerenes from the Dirac equation. *Nuclear Physics B*, 406(3), 771-794.
- [5] Iijima, S., Ajayan, P. M. (1992). Smallest carbon nanotube. *Nature*, 358, 23-23.
- [6] Terrones, M. (2003). Science and technology of the twenty-first century: synthesis, properties, and applications of carbon nanotubes. *Annual review of materials research*, 33(1), 419-501.
- [7] Schwarz, H. A. (1972). *Gesammelte mathematische abhandlungen (Vol. 260)*. American Mathematical Soc..
- [8] Terrones, H., Mackay, A. L. (1992). The geometry of hypothetical curved graphite structures. *Carbon*, 30(8), 1251-1260.
- [9] Mackay, A. L., Terrones, H. (1991). Diamond from graphite. *Nature*, 352(6338), 762-762.
- [10] Huang, M. Z., Ching, W. Y., Lenosky, T. (1993). Electronic properties of negative-curvature periodic graphitic carbon surfaces. *Physical Review B*, 47(3), 1593.
- [11] Terrones, H., Terrones, M. (2003). Curved nanostructured materials. *New Journal of Physics*, 5(1), 126.
- [12] Odkhuu, D., Jung, D. H., Lee, H., Han, S. S., Choi, S. H., Ruoff, R. S., Park, N. (2014). Negatively curved carbon as the anode for lithium ion batteries. *Carbon*, 66, 39-47.
- [13] Braun, E., Lee, Y., Moosavi, S. M., Barthel, S., Mercado, R., Baburin, I. A., ... Smit, B. (2018). Generating carbon schwarzites via zeolite-templating. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 115(35), E8116-E8124.

- [14] Gonzalez, J., Herrero, J. (2010). Graphene wormholes: a condensed matter illustration of Dirac fermions in curved space. *Nuclear physics B*, 825(3), 426-443.
- [15] Gonzalez, J., Guinea, F., Herrero, J. (2009). Propagating, evanescent, and localized states in carbon nanotube–graphene junctions. *Physical Review B*, 79(16), 165434.
- [16] Pudlak, M., Pincak, R. (2009). Electronic properties of double-layer carbon nanotubes. *The European Physical Journal B*, 67(4), 565-576.
- [17] Smotlacha, J. (2014, November). The chiral massive fermions in the graphitic wormhole. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 563, No. 1, p. 012027). IOP Publishing.
- [18] Pincak, R., Smotlacha, J. (2013). Analogies in electronic properties of graphene wormhole and perturbed nanocylinder. *The European Physical Journal B*, 86(11), 1-7.
- [19] Capozziello, S., Pincak, R., Saridakis, E. N. (2018). Constructing superconductors by graphene Chern–Simons wormholes. *Annals of Physics*, 390, 303-333.
- [20] Atanasov, V., Saxena, A. (2010). Tuning the electronic properties of corrugated graphene: Confinement, curvature, and band-gap opening. *Physical Review B*, 81(20), 205409.
- [21] Obispo, A. E., Neto, F. A. C., Vicente, A. G. J., Castro, L. B. (2020). Comment on “Chern-Simons theory and atypical Hall conductivity in the Varma phase”. *Physical Review B*, 102(20), 207101.
- [22] Palumbo, G., Meichanetzidis, K. (2015). Two-dimensional Chern semimetals on the Lieb lattice. *Physical Review B*, 92(23), 235106.
- [23] Menezes, N., Morais Smith, C., Palumbo, G. (2018). Chern-Simons theory in the Varma phase. In *APS March Meeting Abstracts* (Vol. 2018, pp. L08-004)
- [24] Mukherjee, S., Spracklen, A., Choudhury, D., Goldman, N., Öhberg, P., Andersson, E., Thomson, R. R. (2015). Observation of a localized flat-band state in a photonic Lieb lattice. *Physical review letters*, 114(24), 245504.
- [25] Yamazaki, K., Ochi, M., Ogura, D., Kuroki, K., Eisaki, H., Uchida, S., Aoki, H. (2020). Superconducting mechanism for the cuprate $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3+}$ based on a multiorbital Lieb lattice model. *Physical Review Research*, 2(3), 033356.

- [26] Slot, M. R., Gardenier, T. S., Jacobse, P. H., van Miert, G. C., Kempkes, S. N., Zevnhuizen, S. J., ... Swart, I. (2017). Experimental realization and characterization of an electronic Lieb lattice. *Nature physics*, 13(7), 672-676.
- [27] Guzmán-Silva, D., Mejía-Cortés, C., Bandres, M. A., Rechtsman, M. C., Weimann, S., Nolte, S., ... Vicencio, R. A. (2014). Experimental observation of bulk and edge transport in photonic Lieb lattices. *New Journal of Physics*, 16(6), 063061.
- [28] Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., ... Firsov, A. A. (2004). Electric field effect in atomically thin carbon films. *science*, 306(5696), 666-669.
- [29] Castro Neto, A. H., Guinea, F., Peres, N. M. R., Novoselov, K. S., Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. *Reviews of modern physics*, 81(1), 109-162.
- [30] Andrade Guel, M. L., López López, L. I., Sáenz Galindo, A. (2012). Nanotubos de carbono: funcionalización y aplicaciones biológicas. *Revista mexicana de ciencias farmacéuticas*, 43(3), 9-18.
- [31] Sato, M. (2011). Elastic and plastic deformation of carbon nanotubes. *Procedia engineering*, 14, 2366-2372.
- [32] Iorio, A., Lambiase, G. (2014). Quantum field theory in curved graphene spacetimes, Lobachevsky geometry, Weyl symmetry, Hawking effect, and all that. *Physical Review D*, 90(2), 025006.
- [33] Bercioux, D., Urban, D. F., Grabert, H., Häusler, W. (2009). Massless Dirac-Weyl fermions in a T 3 optical lattice. *Physical Review A*, 80(6), 063603.
- [34] Niță, M., Ostahie, B., Aldea, A. (2013). Spectral and transport properties of the two-dimensional Lieb lattice. *Physical Review B*, 87(12), 125428.
- [35] Goldman, N., Urban, D. F., Bercioux, D. (2011). Topological phases for fermionic cold atoms on the Lieb lattice. *Physical Review A*, 83(6), 063601.
- [36] Goldman, N., Urban, D. F., Bercioux, D. (2011). Topological phases for fermionic cold atoms on the Lieb lattice. *Physical Review A*, 83(6), 063601.
- [37] Bukharaev, A. A., Zvezdin, A. K., Pyatakov, A. P., Fetisov, Y. K. (2018). Straintronics: a new trend in micro-and nanoelectronics and materials science. *Physics-Uspokhi*, 61(12), 1175.

- [38] Choudhury, M. R., Yoon, Y., Guo, J., Mohanram, K. (2010). Graphene nanoribbon FETs: Technology exploration for performance and reliability. *IEEE transactions on nanotechnology*, 10(4), 727-736.
- [39] Matsui, K., Segawa, Y., Namikawa, T., Kamada, K., Itami, K. (2013). Synthesis and properties of all-benzene carbon nanocages: a junction unit of branched carbon nanotubes. *Chemical Science*, 4(1), 84-88.
- [40] McEuen, P. L., Fuhrer, M. S., Park, H. (2002). Single-walled carbon nanotube electronics. *IEEE transactions on nanotechnology*, 1(1), 78-85.
- [41] Yao, Z., Postma, H. W. C., Balents, L., Dekker, C. (1999). Carbon nanotube intramolecular junctions. *Nature*, 402(6759), 273-276.
- [42] Chico, L., Crespi, V. H., Benedict, L. X., Louie, S. G., Cohen, M. L. (1996). Pure carbon nanoscale devices: nanotube heterojunctions. *Physical review letters*, 76(6), 971.
- [43] Rochefort, A., Avouris, P. (2002). Quantum size effects in carbon nanotube intramolecular junctions. *Nano Letters*, 2(3), 253-256.
- [44] Katanaev, M. O., Volovich, I. V. (1992). Theory of defects in solids and three-dimensional gravity. *Annals of Physics*, 216(1), 1-28.
- [45] Katanaev, M. O., Volovich, I. V. (1990). Two-dimensional gravity with dynamical torsion and strings. *Annals of Physics*, 197(1), 1-32.
- [46] Greiner, W., Reinhardt, J. (2013). *Field quantization*. Springer Science Business Media.
- [47] Casana, R., Fainberg, V. Y., Lunardi, J. T., Pimentel, B. M., Teixeira, R. G. (2003). Massless DKP fields in Riemann–Cartan spacetimes. *Classical and Quantum Gravity*, 20(11), 2457.
- [48] Gell-Mann, M. (1964). The Symmetry group of vector and axial vector currents. *Physics Physique Fizika*, 1(1), 63.

VIII. ANEXO: MATRIZ DE CONSISTENCIA

Problema	Objetivos	Hipótesis	Variable	Metodología
<p>PROBLEMA GENERAL</p> <p>¿De qué manera se podría estudiar las propiedades electrónicas y topológicas de nanotubos deformados con geometría catenoidal en redes de Lieb?</p> <p>PROBLEMAS ESPECÍFICOS</p> <p>¿Cuáles serán los efectos inducidos producidos por la deformación geométrica de la red sobre los estados electrónicos?</p> <p>¿Qué tipo de propiedades electrónicas y topológicas se podrán calcular a partir del modelo matemático usado para describir deformaciones catenoidales en redes de Lieb?</p> <p>¿Cómo serán modificadas las propiedades de transporte electrónico de los nanotubos deformados con geometría catenoidal en redes de Lieb cuando estos son sometidos a los efectos de un campo magnético externo?</p>	<p>OBJETIVO GENERAL</p> <p>Proponer un formalismo matemático basado en la implementación del espacio curvo de un catenoide en el Hamiltoniano tipo Dirac-Weyl para poder estudiar las propiedades electrónicas y topológicas de nanotubos deformados con geometría catenoidal en redes de Lieb.</p> <p>OBJETIVOS ESPECÍFICOS</p> <p>Obtener las ecuaciones dinámicas de los portadores de carga en la superficie del nanotubo deformado con geometría catenoidal y analizar su respectiva densidad electrónica.</p> <p>Describir las propiedades electrónicas y topológicas del sistema a partir del comportamiento cuántico (estados ligados o dispersión) de sus portadores de carga frente a los efectos inducidos por las deformaciones geométricas de la red.</p> <p>Introducir un vector cuadripotencial al Hamiltoniano de Lieb mediante el formalismo del acoplamiento mínimo para obtener las nuevas ecuaciones dinámicas de los portadores de carga y así analizar los cambios en la densidad local de estados en las estructuras catenoidales de Lieb.</p>	<p>HIPOTESIS GENERAL</p> <p>Las propiedades electrónicas y topológicas de un nanotubo deformado con geometría catenoidal en redes de Lieb son estudiados mediante la resolución analítica de las ecuaciones dinámicas provenientes del Hamiltoniano tipo Dirac-Weyl en el espacio-tiempo de un catenoide.</p> <p>HIPOTESIS ESPECÍFICAS</p> <p>El potencial inducido por la deformación geométrica es de naturaleza repulsiva, por lo que la densidad de estados electrónicos en la región media del nanotubo deformado es mínima, mientras que la concentración electrónica en los bordes de la estructura es máxima.</p> <p>La densidad de estados electrónicos en un nanotubo deformado con geometría catenoidal no es uniforme, lo que significa que la superficie de esta estructura presenta una mayor facilidad al paso de corriente eléctrica en las regiones donde hay una menor densidad de estados. Asimismo, debido a que la superficie del catenoide es inversamente proporcional a su radio mínimo, cuando esta toma valores muy pequeños, la estructura presentará una resistencia máxima al paso de corriente eléctrica.</p> <p>La densidad de estados electrónicos en un nanotubo deformado es confinada en las regiones cercanas al eje de simetría debido a la acción del campo magnético externo. Esto produce que los portadores de carga experimenten una cuantización de Landau, la cual es responsable de pequeñas oscilaciones en las propiedades de conductancia del material en función de la intensidad del campo magnético.</p>	<p>VARIABLE INDEPENDIENTE</p> <p>Nanotubos deformados con geometría catenoidal en redes de Lieb.</p> <p>VARIABLE DEPENDIENTE</p> <p>Propiedades electrónicas y topológicas.</p>	<p>DISEÑO</p> <p>1- Implementar la información geométrica del elemento de línea de un catenoide al Hamiltoniano de Lieb a través del formalismo de las tétradas. De esta manera, las matrices y las derivadas serán reemplazadas por sus homólogos en espacios curvos.</p> <p>2- Resolver las ecuaciones matriciales provenientes del Hamiltoniano tipo curvo de Lieb para obtener un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden asociadas al comportamiento dinámico de los portadores de carga (cuasipartículas de espín 1)</p> <p>3- Utilizar el método de separación de variables para expresar las ecuaciones dinámicas de los portadores de carga como ecuaciones tipo Schrödinger, donde se analizará un potencial inducido puramente por la deformación geométrica del sistema.</p> <p>4- Resolver analíticamente las ecuaciones dinámicas de los portadores de carga para obtener las respectivas autofunciones del sistema, con las cuales se estudiará la densidad local de estados junto con las propiedades electrónicas y topológicas del sistema.</p> <p>5- Resolver analíticamente las ecuaciones dinámicas modificadas por la presencia de un campo magnético externo, el cual será introducido a través de un acoplamiento mínimo al Hamiltoniano curvo de Lieb para estudiar las nuevas propiedades de transporte de los nanotubos deformados con geometría catenoidal.</p>