

UNIVERSIDAD DE BURGOS

ESCUELA DE DOCTORADO

TESIS DOCTORALES

- TÍTULO:** REGENERACIÓN CUÁNTICA EN FRAGMENTOS DE GRAFENO: EFECTOS DE CURVATURA, ANCLAJE Y CAMPO ELÉCTRICO
- AUTOR:** DE LA HUERTA SAINZ, SERGIO
- PROGRAMA DE DOCTORADO:** QUÍMICA AVANZADA
- ACTO Y FECHA DE LECTURA:** EL ACTO PÚBLICO DE DEFENSA DE TESIS SE DESARROLLARÁ EL DÍA 13 DE JUNIO DE 2022, A LAS 11:00 HORAS, EN EL SALÓN DE ACTOS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS (UNIVERSIDAD DE BURGOS) Y TELEMÁTICAMENTE A TRAVÉS DE MICROSOFT TEAMS
- DIRECTORES:** D. NICOLÁS ALEJANDRO CORDERO TEJEDOR
D. ÁNGEL BALLESTEROS CASTAÑEDA
- TRIBUNAL:** D. JOSÉ VICENTE CUEVAS VICARIO
DÑA. MARÍA ISABEL GÓMEZ AYALA
D. FRANCISCO JAVIER NEGRO VADILLO
D. LUIS MIGUEL MOLINA MARTÍN
DÑA. BLANCA BIEL RUIZ
- RESUMEN:** El fenómeno de la regeneración cuántica, relacionado íntimamente con la distribución de niveles de energía en un sistema y cuyo interés ha aumentado recientemente, ha sido estudiado hasta ahora en materiales bidimensionales como el grafeno o el siliceno empleando modelos analíticos continuos. En esta Tesis presentamos un estudio pionero de la regeneración cuántica en fragmentos de grafeno utilizando un espectro de energías realista obtenido mediante la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT).
- Para el estudio de la regeneración cuántica se ha empleado un paquete de ondas gaussiano formado a partir de los niveles electrónicos obtenidos por DFT. La función de autocorrelación se ha empleado para analizar la evolución temporal del paquete de ondas, presentando un comportamiento oscilatorio complejo que evidencia la recuperación del estado inicial al cabo de diferentes intervalos de tiempo, los denominados tiempos de regeneración. Se ha empleado además una aproximación que ha proporcionado predicciones de gran exactitud.
- Este proyecto se ha enfocado en el análisis de los efectos derivados de la curvatura en el grafeno, simulando fragmentos hexagonales de este material deformados según superficies de diversa curvatura gaussiana (esfera, cilindro e hiperboloide de una hoja). Tras una optimización restringida a fin de conservar la forma general del fragmento, se han obtenido las energías de curvatura respecto al caso plano y el espectro de autovalores para curvaturas de diferentes magnitudes, obteniendo a partir de este último los tiempos de regeneración.
- Se han contemplado también otros factores de interés, como el grado de fijación del fragmento a una superficie, de cara a su posible realización experimental, y la presencia de un campo eléctrico externo perpendicular al fragmento, cuyos efectos en la inducción de la curvatura han sido estudiados, obteniendo resultados con tendencias bien definidas y compatibles con posibles transiciones de fase debidas a la generación de pseudo-campos magnéticos. Finalmente, el fenómeno del Zitterbewegung se ha estudiado para estos fragmentos usando un paquete de ondas doble.
- PALABRAS CLAVE:** Regeneración cuántica, curvatura gaussiana, paquete de ondas, grafeno, Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)
- KEYWORDS:** Quantum revival, Gaussian curvature, wavepacket, graphene, Density Functional Theory (DFT)r