



## Nota de prensa

19/07/2017

# Desarrollan un método para descubrir nuevos materiales con propiedades topológicas

La investigación internacional en la que participan investigadores de la UPV/EHU y el DIPC es portada de la revista *Nature*

Un equipo internacional de investigadores en el que participan investigadores de la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea y del Donostia International Physics Center (DIPC), junto con científicos de la Universidad de Princeton y del Instituto Max Planck de Dresden, ha introducido y desarrollado una nueva teoría para descubrir y caracterizar materiales con propiedades topológicas de forma sistemática y eficaz. El trabajo, portada esta semana en la prestigiosa revista *Nature*, ha abierto las puertas a una nueva forma de entender esos prometedores materiales que son aislantes y metales al mismo tiempo y ha demostrado que son más comunes en la naturaleza de lo que se pensaba.



Credit - illustration by JVG

Hasta hace prácticamente 10 años los materiales, según las teorías de física y química establecidas, se dividían en metales, semimetales y aislantes, siendo los materiales semiconductores un caso particular de estos últimos. Esa clasificación en tres grandes grupos se basa en lo que se conoce como "teoría de bandas", que básicamente se fija en propiedades electrónicas y en cómo los enlaces entre los elementos químicos de un material influyen en esas propiedades. Desde el punto de vista físico, la asignación de un material a uno de esos tipos depende de la existencia o no de un salto energético entre las bandas de valencia y conducción y, si existe este salto, de su magnitud.

Tras un largo paréntesis sin descubrir nuevos estados o propiedades, en los últimos tiempos ha resurgido el interés en este área de conocimiento a raíz de la predicción, mediante la teoría de bandas convencional, de unos materiales que son aislantes en su interior, pero son conductores en la superficie, es decir, son aislantes y metales al mismo tiempo. Resulta, además, que ese estado conductor o metálico de la superficie apenas presenta pérdidas de energía a temperatura ambiente y es muy robusto frente a posibles impurezas: se dice que está protegido topológicamente. La topología es la rama de las matemáticas que estudia qué propiedades de los cuerpos geométricos no se alteran al deformarlos de manera continua. Siguiendo con esa



analogía, los materiales topológicos son aquellos cuyas propiedades están definidas o "protegidas" por la propia estructura y simetría del cristal, de forma que si no se modifica dicha estructura, estas propiedades no se pueden cambiar.

El interés surgido a partir del descubrimiento de estos materiales topológicos con propiedades exóticas lo demuestra el hecho de que el Premio Nobel de Física de 2016 fue concedido a tres de los pioneros de ese nuevo campo. Sin embargo, a pesar de las extraordinarias y prometedoras propiedades de estos materiales, de los casi 200.000 materiales que hay catalogados en las bases de datos de estructuras inorgánicas, apenas se han encontrado en los últimos 10 años 100 materiales que presenten esta fase o estado topológico.

Ahora, un equipo internacional de investigadores, en el que han tomado parte los profesores Luis Elcoro y Moisés Aroyo, del Departamento de Física de la Materia Condensada de la Facultad de Ciencia y Tecnología de la UPV/EHU y Maia García Vergniory, del Departamento de Física Aplicada II de la misma facultad de la UPV/EHU y también investigadora del DIPC, ha introducido y desarrollado un nuevo paradigma en la teoría de estructura electrónica de bandas, completando así el trabajo pionero, entre otros, del físico suizo Felix Bloch en la primera mitad del siglo XX. Este novedoso y revolucionario estudio introduce nuevos ingredientes en la teoría de Bloch y proporciona una forma más descriptiva, rápida y eficaz para descubrir y caracterizar metales y aislantes con propiedades topológicas.

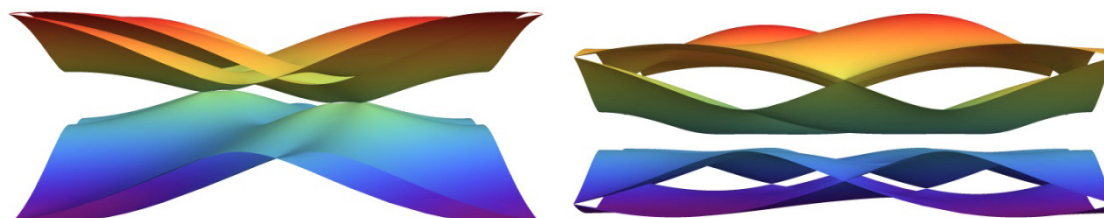
El grupo de investigación ha utilizado su nueva teoría de "química cuántica topológica" para caracterizar todos los tipos de bandas elementales posibles para todas las simetrías posibles, generando una especie de catálogo de consulta a disposición de toda comunidad científica, en el cual investigadores de todo el mundo puedan buscar fácilmente candidatos de posibles materiales topológicos, y evitar tediosos y costosos cálculos computacionales. Toda esta información y las herramientas para su elaboración se encuentra disponible en el Bilbao Crystallographic Server ([www.cryst.ehu.eus](http://www.cryst.ehu.eus)), desarrollado y mantenido por personal docente e investigador de la UPV/EHU.

"Los resultados publicados demuestran que los aislantes y materiales topológicos son más comunes en la naturaleza de lo que hasta ahora se había creído; lo cual resulta muy prometedor e interesante, ya que abre las puertas a una nueva forma de entender los materiales, así como a una electrónica de baja disipación energética, y tantos otros descubrimientos que están por llegar", explican los autores del estudio.

## Referencia bibliográfica

"Topological quantum chemistry", Barry Bradlyn, L. Elcoro, Jennifer Cano, M. G. Vergniory, Zhijun Wang, C. Felser, M. I. Aroyo, and B. Andrei Bernevig. Nature (2017). [DOI: 10.1038/nature23268](https://doi.org/10.1038/nature23268)

## Imagen



Los investigadores han descubierto cómo identificar nuevos materiales topológicos, que poseen prometedoras propiedades electrónicas. La técnica utilizada involucra buscar conexiones entre la teoría de bandas, que describe los niveles de energía de los electrones en un sólido, con la naturaleza topológica del material. Las bandas interconectadas de la figura de la izquierda se corresponden con un semimetal topológico, mientras que las bandas no-conectadas de la figura derecha indican que el material es un aislante topológico. (Imagen cortesía de *Nature*)