



---

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
FACULTAD DE CIENCIAS

ÓPTICA ELECTRÓNICA EN HETEROUNIONES DE  
GRAFENO

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:  
**FÍSICO**

PRESENTA:

**Jose Emmanuel Paredes Rocha**

DIRECTOR:

Dr. Thomas Werner Stegmann



Ciudad Universitaria, CDMX, 2019



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



---

1. Datos del alumno

Paredes

Rocha

Jose Emmanuel

466 121 4341

Universidad Nacional Autónoma de

México

Facultad de Ciencias

Física

415016157

2. Datos del tutor

Dr

Thomas Werner

Stegmann

3. Datos del sinodal 1

Dr

Thomas Henry

Seligman

Schurch

4. Datos del sinodal 2

Dra

Laura Natalia

Serkovic

Loli

5. Datos del sinodal 3

Dr

José Eduardo

Barrios

Vargas

6. Datos del sinodal 4

Dr en C.A.

Andrés Rafael

Botello

Méndez

7. Datos del trabajo escrito

Óptica electrónica en heterouniones de grafeno

60 p

2019



*A mis padres: Meli y Pepe.  
Por ser el soporte incondicional que me ha  
permitido lograr todo lo que tengo hasta ahora.*



# Agradecimientos

---

A mis padres José Paredes R. y Amelia Rocha D., por su apoyo, amor y cariño incondicionales que me han dado a lo largo de toda la vida. No me alcanzará la vida para demostrarles mi infinito agradecimiento, Dios los bendiga siempre. Sin ellos nada de esto hubiera sido posible.

A mi hermano Andrés, que siempre me ha apoyado y motivado a ser mejor persona y superar mis miedos y ponerme metas cada vez mejores. Con el gran cariño que le tengo y lo agradecido que estoy de que sea mi hermano.

A Ana Raquel Alonso V., por ser mi compañera de vida, mejor amiga, cómplice, confidente y muchos otros adjetivos admirables más que no alcanza esta hoja para ponerlos. Agradezco la infinita paciencia y todo el amor que me demuestra día con día. Su compañía en la vida la ha hecho más llevadera y bonita.

A mis amigos Eli, César, Jaz, Naomi, Isra, Tania y Alan, por mantener mi cordura y paciencia a lo largo de la carrera. Agradezco su apoyo y las experiencias vividas con ellos, que hicieron este tiempo más pasadero.

A Thomas Stegmann, por ser mi tutor, director de tesis, profesor, guía y amigo. Agradezco su generosidad al brindarme la oportunidad de recurrir a su capacidad y experiencia científica en un marco de confianza, respeto y amistad, fundamentales para el término de este trabajo; también por su motivación constante de crecer profesionalmente y todo el apoyo que me ha dado. En verdad una gran persona.

A Yonatan Betancur O., por su tiempo invertido, disponibilidad y amabilidad en realizar las discusiones, comentarios y revisiones necesarias para que este trabajo saliera eficiente y eficazmente.

Esta investigación fue realizada gracias al proyecto UNAM PAPIIT IA101618. Agradezco por la beca recibida y la oportunidad de presentar mis resultados en el LXI Congreso Nacional de Física en Puebla, Pue., en la Reunión de Transporte a la Nanoescala en Cuernavaca, Mor. y en la Reunión de la División de Estado Sólido en Papantla, Ver.





# Declaración de autenticidad

---

Por la presente declaro que, salvo cuando se haga referencia específica al trabajo de otras personas, el contenido de esta tesis es original y no se ha presentado total o parcialmente para su consideración para cualquier otro título o grado en esta o cualquier otra Universidad. Esta tesis es resultado de mi propio trabajo y no incluye nada que sea el resultado de algún trabajo realizado en colaboración, salvo que se indique específicamente en el texto.

Jose Emmanuel Paredes Rocha. Ciudad Universitaria, CDMX, 2019



# Resumen

---

En el presente trabajo se investiga el transporte electrónico en nanocintas de grafeno con regiones de distinto dopaje, que en consecuencia forman una heterounión. En particular, se estudian las uniones  $pn$ . Estas uniones se describen mediante un Hamiltoniano de Enlace Fuerte donde el dopaje se hace mediante un potencial electrostático. Aplicando el método de *funciones de Green fuera de equilibrio* (NEGF) se calcula numéricamente el flujo de corriente en la unión. Se compara la corriente con la aproximación de la óptica geométrica. En esta aproximación se predice que las trayectorias de los electrones, que inciden en la interfaz, están descritas por la *ley de Snell de electrones* (LSE), donde los distintos potenciales de la unión  $pn$  juegan el papel de los índices de refracción.

Para las uniones  $pn$  con interfaz abrupta, se confirma en general la LSE para los haces de electrones que inciden a la interfaz, ya que variando los parámetros de la unión y el ángulo de inyección se obtiene que los haces reflejados y transmitidos siguen la óptica geométrica. En los resultados de las investigaciones en uniones  $pn$  con perfil suave presentadas, se muestra en acuerdo con la aproximación semiclásica que sólo los haces que inciden normal a la interfaz se transmiten. Sumado a lo anterior, se observan más efectos por la naturaleza ondulatoria y el ancho finito del haz inyectado. Cerca de la interfaz se observa un patrón ondulatorio producto de la interferencia de los haces incidente y reflejado. También, se obtiene transmisión para ángulos mayores al ángulo crítico predicho por la LSE, que se genera por la difracción del haz de electrones. Además, se estudian los valores de los coeficientes de reflexión y transmisión por ambas teorías y se obtiene semejanza entre ellas.

También se muestran y discuten las posibles aplicaciones de las heterouniones en grafeno para varios dispositivos de la nanoelectrónica, como guías de onda, divisores y colimadores de haces de electrones y filtros de corriente.



# Abstract

---

In this work, the electron transport in graphene nanoribbons is investigated. The nanoribbons have regions with different doping and hence, form heterojunctions. In particular, pn junctions are studied. These junctions are described by means of a tight-binding Hamiltonian, where the doping is realized by an electrostatic potential.

Applying the *non-equilibrium Green functions* (NEGF) method, the current flow is calculated numerically. The current is compared with semiclassical trajectories from the geometric optics approximation. In this approximation, the trajectories of electrons that cross the interface are described by *Snell's law for electrons* (LSE), where the different potentials in the pn junction play the role of the refractive indices.

In general, for the pn junctions with step potential, the calculated current flow paths agree well with the trajectories that are obtained from the LSE. For the pn junctions with a smooth interface, it is shown that in accordance with the semiclassical approximation only beams of normal incidence are transmitted. Moreover, due to the wave nature and the finite width of the electron beams, new phenomena are observed. A ripple pattern parallel to the interface is found, which results from the interference between the incident and reflected beams. Moreover, transmission beyond the critical angle predicted by the LSE is observed, which is caused by the diffraction of the beam. Additionally, the values of coefficients of transmission and reflection are studied with both theories and qualitative agreement is obtained.

Finally, the possible applications of the graphene heterojunctions for several nanoelectronics devices, such as waveguides, beam splitters, and electronic beam collimators are shown and discussed.



# Índice general

---

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Fundamentos del Transporte Cuántico en nanosistemas</b>	<b>3</b>
2.1. Hamiltoniano de amarre fuerte . . . . .	3
2.2. Funciones de Green fuera de equilibrio (NEGF) . . . . .	4
2.2.1. Función espectral y densidad de estados . . . . .	4
2.2.2. Función de Green . . . . .	5
2.2.3. Función de correlación $\mathbf{G}^n$ . . . . .	5
2.2.4. $\mathbf{G}$ y $\mathbf{G}^n$ en sistemas cuánticos abiertos . . . . .	6
2.3. Corriente en sistemas abiertos . . . . .	9
<b>3. Grafeno y Heterouniones</b>	<b>11</b>
3.1. Características del grafeno . . . . .	11
3.1.1. Red de grafeno . . . . .	12
3.1.2. Hamiltoniano para grafeno . . . . .	14
3.1.3. Propiedades electrónicas de las nanocintas de grafeno . . . . .	14
3.1.4. Electrones de Dirac . . . . .	15
3.2. Heterouniones en grafeno . . . . .	17
3.2.1. Dopaje tipo n y p en grafeno . . . . .	18
3.2.2. Unión $pn$ : Potencial abrupto y potencial suave . . . . .	19
3.2.3. Ley de Snell de electrones (LSE) . . . . .	21
3.2.4. Simulación de uniones $pn$ . . . . .	24
3.3. Contactos en Nanocintas de grafeno . . . . .	27
3.3.1. Extensión de NEFG a varios contactos . . . . .	27
3.3.2. Contactos de Banda Ancha . . . . .	28
3.3.3. Contactos de las simulaciones . . . . .	29
3.3.4. Contacto de inyección . . . . .	29
<b>4. Resultados numéricos y análisis</b>	<b>33</b>
4.1. Corriente y ley de Snell de electrones (LSE) . . . . .	33
4.2. Efectos del ancho finito del haz de electrones inyectado . . . . .	42
4.2.1. Coeficientes de Transmisión y Reflexión . . . . .	42
4.2.2. Ángulo crítico y difracción del haz . . . . .	45



## ÍNDICE GENERAL

---

4.3. Interfaz con potencial suave . . . . .	47
<b>5. Conclusiones</b>	<b>51</b>
<b>A. Equivalencia del ángulo incidente</b>	<b>53</b>
<b>B. Tamaño de la nanocinta</b>	<b>55</b>

---

## Capítulo 1

# Introducción

---

El grafeno consiste en una capa de carbono de un átomo de grosor y que tiene la estructura del grafito, y fue obtenido por primera vez en 2004 por Novoselov y Geim [1]. Hoy en día, el grafeno es uno de los materiales más estudiados, pues la base de datos de *Web of Science* muestra más de 180,000 trabajos que tienen como palabra clave “graphene” (33 trabajos por día, aproximadamente). Esto muestra que grafeno no es un tema marginal, sino que hay un gran interés en éste.

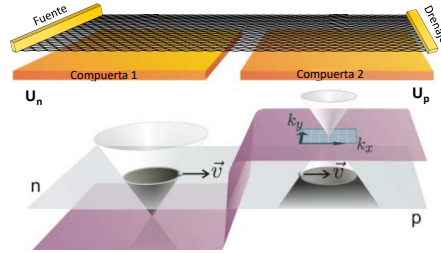
El camino libre medio de los electrones en el grafeno puro es cerca de  $1\ \mu\text{m}$  a temperatura ambiente [2] (el camino libre medio del silicio es  $0.04\ \mu\text{m}$  [3], dos ordenes de magnitud menos que el grafeno). Si las estructuras que se estudian tienen una longitud (en la dirección de propagación de los electrones) mucho menor al camino libre medio, entonces el transporte se puede describir como balístico en estas estructuras. El transporte balístico en el grafeno permite describir las trayectorias de los electrones como rayos, teniendo como consecuencia que se puedan observar analogías con la óptica clásica en heterouniones de grafeno. Entre las primeras utilidades que se vieron para las heterouniones de grafeno, por la analogía óptica, son las lentes de Veselago y las lentes super-divergentes [4, 5], así como colimadores y guías de haces de electrones usando uniones con interfaz suave [6]. Recientemente se han logrado realizar de forma experimental guías de onda de haces de electrones [7], lentes de Veselago [8] y transistores FET a base de grafeno [9]. También, se ha logrado hacer experimentalmente uniones  $pn$  con dopaje de perfil atómico [10]. De esto último surge la motivación del estudio de las uniones  $pn$  con potencial abrupto, sin dejar al lado las uniones con potencial suave. Para realizar las heterouniones en grafeno, un método utilizado para lograr el dopaje en nanocintas es usar compuertas en distintas regiones de éstas para generar regiones tipo  $n$  y tipo  $p$ , y a esas compuertas aplicarles un voltaje. Este método conserva la forma de la estructura de bandas del grafeno homogéneo (sin dopaje) [11]. En la figura 1.1 se presenta un esquema de como se realiza la uniones  $pn$  con compuertas.

El costo computacional de los cálculos de transporte cuántico en nanosistemas tan grandes (como los que se presentan en este trabajo:  $170\text{nm}\times 200\text{nm}$ ) puede ser alto,

## 1. INTRODUCCIÓN

---

por lo que reducir este costo sin duda es muy útil. Debido a que en años recientes se han realizado experimentos en heterouniones de grafeno, usando la analogía del transporte electrónico con la óptica geométrica, para realizar dispositivos que puedan ayudar a controlar las trayectorias electrónicas sobre las nanocintas de grafeno y han obtenido buenos resultados [7, 8], se plantea que el transporte cuántico en estos sistemas se puede describir con óptica de rayos y así disminuir el costo computacional de los cálculos. Por ello, el objetivo de este trabajo es investigar el transporte electrónico en heterouniones  $pn$  de grafeno (usando uniones con interfaz abrupta y suave) mediante simulaciones numéricas, y presentar los resultados obtenidos. Es de particular interés hacer la comparación entre el flujo de corriente, calculado a partir del método de NEGF, y la aproximación semiclásica de la óptica geométrica con rayos (ley de reflexión y ley de Snell para electrones); esto, para poder probar la hipótesis de que el transporte cuántico se puede estudiar por óptica de rayos en las heterouniones de grafeno. Para ello, se aborda el problema del transporte electrónico con haces de electrones de ancho finito y compararlo con su parte semiclásica. Así, esta tesis contribuye al entendimiento del flujo de corriente en las heterouniones en grafeno (en particular en las uniones  $pn$ ) con su analogía de la óptica clásica, además de dar pie a que estos cálculos puedan ser accesibles con un bajo costo computacional.



**Figura 1.1:** Unión  $pn$  de grafeno. Superior: Hoja de grafeno colocada sobre una compuerta dividida, la cual se usa para generar regiones tipo  $n$  (izquierda) y tipo  $p$  (derecha). Inferior: Diagrama de energía para la unión  $pn$ , que muestra la posición del nivel de Fermi. Figura modificada de [5, fig. 1].

La estructura de esta tesis consta de cinco capítulos. En el capítulo 2 se desarrollan las definiciones y conceptos para el transporte cuántico que llevan a obtener las ecuaciones del método de NEGF. El capítulo 3 contiene tres temas: las propiedades físicas y electrónicas del grafeno homogéneo, el dopaje (a partir de un potencial electrostático) y heterouniones en grafeno, y los contactos que se colocan en los bordes de las nanocintas de grafeno para estimar la corriente cuántica. En la parte de las heterouniones, se plantean las condiciones del potencial de dopaje para obtener la ley de Snell de electrones (LSE). También, en este capítulo se describen las condiciones y características de la nanocinta y los contactos para el cálculo de la corriente cuántica. Finalmente, los capítulos 4 y 5 están dedicados a la exhibición de las simulaciones numéricas, interpretación de los resultados obtenidos y las conclusiones derivadas de éstos.

# Fundamentos del Transporte Cuántico en nanosistemas

---

En este capítulo se hace una introducción al transporte cuántico en nanosistemas. Se utiliza el modelo de amarre fuerte (*tight-binding*) y el método de funciones de Green fuera de equilibrio (NEGF); esto ha sido descrito por Stegmann [12] y Datta en sus libros [13, 14]. Aquí se seguirá esta teoría considerando un nanosistema que lleva a las nanocintas del grafeno (véase figura 2.1), con el fin de calcular el flujo de corriente en éste, y posteriormente realizar las heterouniones de grafeno (véase figura 1.1).

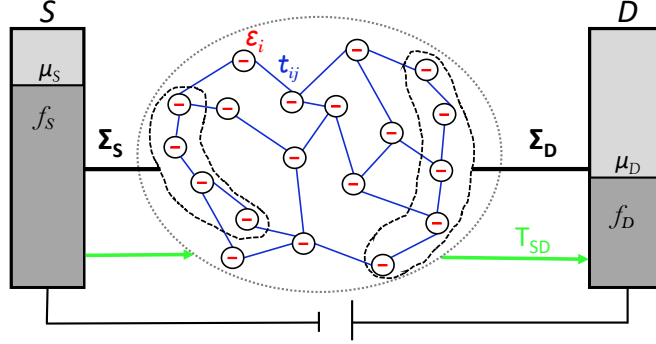
## 2.1. Hamiltoniano de amarre fuerte

Con el modelo de amarre fuerte, un nanosistema se describe por un Hamiltoniano  $H$ , que se describe en esta tesis como

$$H = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{\langle i,j \rangle} \left( t_{ij} |i\rangle \langle j| + \underbrace{t_{ji}^* |j\rangle \langle i|}_{H.c.} \right). \quad (2.1)$$

La hipótesis principal del amarre fuerte indica que  $\varepsilon_i$  es el potencial orbital de  $|i\rangle$  (estado del  $i$ -ésimo sitio), y que  $t_{ij}$  es la energía de enlace entre  $|i\rangle$  y  $|j\rangle$ , como es mencionado en [15].

Una forma de visualizar este Hamiltoniano  $H$  es mostrada en la figura 2.1, como una red de sitios (círculos negros) encerrada por una elipse punteada, donde los enlaces entre sitios son líneas azules y la energía de sitio de cada átomo es representada en rojo.



**Figura 2.1:** Esquema del nanosistema tratado en esta tesis, donde se presenta el transporte de electrones en un nanosistema abierto, conectado a la fuente  $S$  y al drenaje  $D$ ; el transporte es de  $S$  a  $D$ . Se observa que el sistema es una red simple con energías de sitio  $\varepsilon_i$  y de enlace  $t_{ij}$  encerrada por una elipse punteada.  $f_I$  y  $\mu_I$  representan la función de distribución de energía y el potencial químico del reservorio, respectivamente, con  $I \in \{S, D\}$ .

## 2.2. Funciones de Green fuera de equilibrio (NEGF)

En esta sección se introducen definiciones y conceptos referentes a dos resultados muy importantes del método NEGF, que son la función de Green (2.18) y la función de correlación (2.21b) del nanosistema. Estas ecuaciones permiten implementar el cálculo numérico de la corriente en el nanosistema.

### 2.2.1. Función espectral y densidad de estados

La *función espectral* de un sistema proporciona la información de los estados electrónicos, independientemente si éstos están ocupados o no, relacionándose con la generalización de la densidad de estados (DOS) [16]. Además, contiene la información de la correlación entre los estados.

La función espectral se define a partir del Hamiltoniano del sistema como

$$A(E) := 2\pi\delta(EI - H), \quad (2.2)$$

donde  $E$  es la energía del electrón y  $I$  es la matriz identidad  $I$  (de la dimensión de  $H$ ); se supondrá a partir de ahora que  $E$  multiplica a  $I$  cuando se trate de matrices.

Considerando las eigenfunciones  $\psi_n(\mathbf{r})$  y eigenenergías  $\epsilon_n$  del Hamiltoniano  $H$  en el espacio real, la función espectral  $A$  se escribe como

$$A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = 2\pi \sum_n \psi_n(\mathbf{r}) \delta(E - \epsilon_n) \psi_n^*(\mathbf{r}'), \quad (2.3)$$

donde  $\mathbf{r}$  y  $\mathbf{r}'$  son las posiciones de los átomos en el sistema. De esta forma, los elementos

de la diagonal de  $A$  representan la densidad local de estados (LDOS)<sup>1</sup>, de tal forma que la densidad total de estados,  $D(E)$ , es la suma de todas las LDOS, y por tanto ésta se puede obtener como la traza de (2.2):

$$D(E) = \frac{1}{2\pi} \text{Tr}(A(E)) = \frac{1}{2\pi} \sum_n \delta(E - \epsilon_n). \quad (2.4)$$

### 2.2.2. Función de Green

Las funciones de Green correspondientes a un sistema están relacionadas con la función espectral  $A$ , pues la función de distribución  $\delta$  de (2.3) se puede representar como

$$2\pi\delta(E - \epsilon_n) = \frac{2\nu}{(E - \epsilon_n)^2 + \nu^2} = i \left( \frac{1}{E - \epsilon_n + i\nu} - \frac{1}{E - \epsilon_n - i\nu} \right), \quad (2.5)$$

donde  $\nu$  es un número infinitesimal positivo. Con esta representación para  $\delta$ , la función espectral se puede escribir como

$$A(E) = 2\pi\delta(E - H) = i \left( \underbrace{(E - H + i\nu)^{-1}}_G - \underbrace{(E - H - i\nu)^{-1}}_{G^\dagger} \right) = -2 \text{Im}(G), \quad (2.6)$$

donde se definen la función de Green retardada (o simplemente función de Green)  $G$ , y la función de Green avanzada  $G^\dagger$ .

Las definiciones de  $G$  y  $G^\dagger$  se siguen de que la función de Green del sistema es solución de la ecuación

$$(E - H + i\nu)G = I, \quad (2.7)$$

y la conjugada transpuesta de ésta, donde  $I$  es la matriz identidad de la dimensión del sistema.

### 2.2.3. Función de correlación $G^n$

La correlación entre estados del nanosistema está dada por la función  $G^n$ . La correlación entre dos estados  $|i\rangle$  y  $|j\rangle$  está descrita por el elemento

$$G_{ij}^n := 2\pi |i\rangle \langle j|. \quad (2.8)$$

La diagonal de esta matriz ( $i = j$ ) contiene la auto-correlación del estado  $|i\rangle$ , que en la base local  $\langle \mathbf{r} | \cdots | \mathbf{r} \rangle$  da  $G_{ii}^n = 2\pi |\psi_i(\mathbf{r})|^2$ , es decir, la densidad de probabilidad (o densidad de electrones) asociada a dicho estado (salvo el factor de  $2\pi$ ).

En equilibrio, la función de Fermi  $f(E - \mu)$  indica que todos los estados están ocupados hasta el valor del potencial químico  $\mu$  (se desprecian los efectos de temperatura finita). Por ende, la densidad de electrones a energía  $E$  está dada por la ocupación de la

---

<sup>1</sup>Ya que la LDOS se da por  $\rho(\mathbf{r}, E) = \frac{1}{2\pi} A(\mathbf{r}, \mathbf{r}, E)$  y el elemento matricial que corresponde al  $i$ -ésimo sitio está dado por  $\rho_i(\mathbf{r}) = |\psi_i(\mathbf{r})|^2$

densidad de estados por la función  $f(E - \mu)$ , y así la función de correlación del sistema es

$$G_{eq}^n(E) = A(E)f(E - \mu), \quad (2.9)$$

donde  $A(E)$  es la función espectral.

### 2.2.4. G y G<sup>n</sup> en sistemas cuánticos abiertos

Para el estudio del transporte cuántico en un nanosistema, se requiere conectarlo a una fuente donde se inyectan los electrones y a un drenaje que los recolecte. En la figura 2.1 se presenta un nanosistema descrito por un Hamiltoniano  $H$  conectado a la fuente  $S$  y al drenaje  $D$ ; dado el equilibrio local de los reservorios, su distribución de energía está dada por la distribución de Fermi  $f_{S/D} := f(E - \mu_{S/D})$ , donde  $\mu_{S/D}$  es el potencial químico correspondiente al reservorio. El voltaje  $V$  que se aplica al sistema cumple que  $\mu_S - \mu_D = eV$ , siendo  $e$  la carga del electrón, de tal forma que la diferencia entre  $f_S$  y  $f_D$  pone al sistema fuera del equilibrio.

La conexión de los reservorios al nanosistema se describe mediante la matriz de acoplamiento  $\tau_{S/D}$ ; esta matriz  $\tau$  define qué sitios (o átomos) del subespacio de Hilbert del contacto están acoplados a qué sitios del subespacio del nanosistema central ( $\tau_{S/D}$  están representadas por regiones encerradas por líneas discontinuas negras en la figura 2.1).

Al conectar el nanosistema con los reservorios, éstos últimos también sufren perturbaciones, pues por un lado se comienzan a extraer (o inyectar, según sea el caso del reservorio) electrones, pero a su vez el nanosistema reinyecta (o “re-extrae”) electrones al reservorio.

Cuando los reservorios  $S$  y  $D$  están aislados, se describen por los Hamiltonianos  $H_{S/D}$ , de tal forma que siguen las ecuaciones de Schrödinger

$$(E - H_{S/D}) |\Phi_{S/D}\rangle = 0. \quad (2.10)$$

Cuando los contactos<sup>2</sup> se perturban por la conexión con el nanosistema, donde dicha perturbación se puede escribir por  $i\nu$  ( $\nu$  número positivo infinitesimal), las ecuaciones de Schrödinger se reescriben como

$$(E - H_{S/D} + i\nu) |\Phi_{S/D}\rangle = |Q_{S/D}\rangle. \quad (2.11)$$

La motivación física de la transición de (2.10) a (2.11) se basa en que en la extracción y reinyección de electrones a los reservorios, como se expone a continuación. Teniendo un Hamiltoniano efectivo  $H_{ef} = H_{S/D} - i\nu$ , los estados en el reservorio son  $|\Psi_{S/D}(t)\rangle = e^{-itH_{ef}/\hbar} |\Psi_{S/D}\rangle = \left[ e^{-itH_{S/D}/\hbar} |\Psi_{S/D}\rangle \right] [e^{-\nu t/\hbar}]$ ; el primer término es una

---

<sup>2</sup>También se les llama *contactos* a los reservorios que se conectan al nanosistema

propagación hermitiana y el segundo es un decaimiento exponencial, por lo que la parte  $i\nu |\Phi_{S/D}\rangle$  representa una pérdida del sistema, y para compensar la ecuación  $|Q_{S/D}\rangle$  representa una ganancia. De este modo, para conservar el equilibrio local del reservorio la cantidad extraída debe ser igual a la reinyectada, y así  $i\nu |\Phi_{S/D}\rangle = |Q_{S/D}\rangle$ . En la ecuación (2.11),  $E$  deja de ser eigenenergía del Hamiltoniano y pasa a ser una variable independiente que da la energía de excitación, y  $|\Phi_{S/D}\rangle$  pasa a ser una respuesta del reservorio ante excitaciones externas. [14]

Los estados extraídos del reservorio se extienden por el nanosistema y excitan estados  $|\psi\rangle$  en éste; estos estados excitados del nanosistema pueden volver al reservorio como estados excitados  $|\varphi_{S/D}\rangle$ . De este modo, la ecuación de Schrödinger que resulta del sistema acoplado (nanosistema+contactos) es

$$\begin{array}{c} \text{S} \\ \text{Nanosis.} \\ \text{D} \end{array} \begin{array}{ccc} \text{S} & \text{Nanosis.} & \text{D} \\ \left( \begin{array}{ccc} E - H_S + i\nu & -\tau_S^\dagger & 0 \\ -\tau_S & H - E & -\tau_D \\ 0 & -\tau_D^\dagger & E - H_D + i\nu \end{array} \right) & \begin{array}{c} |\Phi_S + \varphi_S\rangle \\ |\psi\rangle \\ |\Phi_D + \varphi_D\rangle \end{array} & = \begin{array}{c} |Q_S\rangle \\ 0 \\ |Q_D\rangle \end{array} \end{array} \quad (2.12)$$

Para obtener una expresión de los estados excitados que se inyectan en los reservorios, se utilizan las filas de los contactos en (2.12), tomando en consideración (2.11), de tal forma que

$$|\Phi_S\rangle = G_S \tau_S^\dagger |\psi\rangle, \quad (2.13a)$$

$$|\Phi_D\rangle = G_D \tau_D^\dagger |\psi\rangle, \quad (2.13b)$$

donde  $G_{S/D} := (E - H_{S/D} + i\nu)$  son las funciones de Green de los reservorios. Las expresiones (2.13) tienen como consecuencia que la fila del nanosistema en (2.12) se expresa como

$$(E - H - \Sigma_S - \Sigma_D) |\psi\rangle = |Q\rangle, \quad (2.14)$$

donde se definen las llamadas *autoenergías* de los contactos como

$$\Sigma_S := \tau_S G_S \tau_S^\dagger, \quad (2.15a)$$

$$\Sigma_D := \tau_D G_D \tau_D^\dagger, \quad (2.15b)$$

y la excitación total del nanosistema  $|Q\rangle$  como

$$|Q\rangle := \tau_S |\Phi_S\rangle + \tau_D |\Phi_D\rangle. \quad (2.16)$$

De este modo, se pueden escribir los estados del sistema como

$$|\psi\rangle = G |Q\rangle, \quad (2.17)$$

donde se define la función de Green del nanosistema  $G$  como

$$G := (E - H - \Sigma_S - \Sigma_D)^{-1}. \quad (2.18)$$

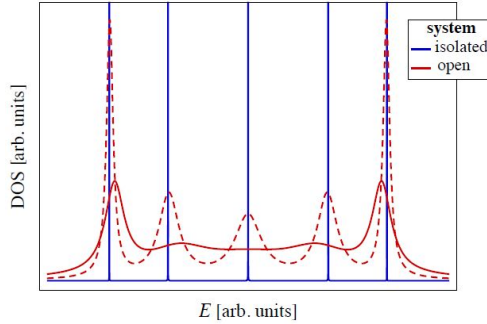
Con el desarrollo anterior se hace una simplificación de estudiar un sistema acoplado



## 2. FUNDAMENTOS DEL TRANSPORTE CUÁNTICO EN NANOSISTEMAS

a sólo tratar el nanosistema, lo que hace que el método descrito en esta sección sea más sencillo, pues la dimensión del espacio de un nanosistema es mucho menor a la del espacio de un sistema acoplado.

El concepto de autoenergía es tratado en la teoría de muchos cuerpos para la descripción de interacciones complicadas con todo el entorno, pero en este caso, hace la descripción de los reservorios cuando se conectan al sistema, de tal forma que puede verse como un Hamiltoniano de los contactos que considera las condiciones de frontera. De este modo, el operador de autoenergía representa una modificación no hermitiana al Hamiltoniano del sistema haciendo un Hamiltoniano efectivo ( $H_{ef} = H + \Sigma_S + \Sigma_D$ ), donde ahora las eigenenergías de  $H_{ef}$  son complejas,  $\varepsilon_n = \varepsilon_{0n} + i\gamma_n$ . En comparación con la DOS del sistema aislado dada por (2.4), ahora la parte imaginaria de las eigenenergías complejas causan ensanchamiento en la DOS del sistema por el término  $e^{-2\gamma t/\hbar}$  (para profundizar, véase [14, cap. 8]); en la figura 2.2 se visualiza el ensanchamiento de la DOS a causa de los contactos en el sistema. Para el caso particular que se trata en esta tesis, las autoenergías  $\Sigma$  representan la perturbación del nanosistema por los contactos (véase figura 2.1).



**Figura 2.2:** Densidad de estados (DOS) de un nanosistema típico. La DOS de un sistema aislado muestra picos en las eigenenergías (discretas) del Hamiltoniano. Los picos se ensanchan si el sistema se abre cada vez más (de curva discontinua roja a curva continua roja) a los reservorios. Figura tomada de [12, fig. 2.2].

El ensanchamiento en la DOS se describe por la *matriz de ensanchamiento*  $\Gamma$  que se define como

$$\Gamma := i(\Sigma - \Sigma^\dagger), \quad (2.19)$$

y a partir de ello se obtiene la función espectral de nanosistema como<sup>3</sup>

$$A := i(G - G^\dagger) = G(\Gamma_S + \Gamma_D)G^\dagger = A_1 + A_2, \quad (2.20)$$

donde las funciones espectrales  $A_{1/2} := G\Gamma_{S/D}G^\dagger$  representan la densidad de estados

<sup>3</sup>(2.20) se obtiene usando que  $i((G^{-1})^\dagger - G^{-1}) = \Gamma_S + \Gamma_D$  y multiplicando  $G$  por la izquierda y  $G^\dagger$  por la derecha.

de los electrones provenientes de los contactos  $S/D$  <sup>4</sup>.

Usando la ecuación (2.8), considerando que los contactos  $S$  y  $D$  no están acoplados directamente y que éstos están en equilibrio local, se obtiene la función de correlación del nanosistema  $G^n$  como <sup>5</sup>

$$\begin{aligned} G^n &= |\psi\rangle \langle\psi| \stackrel{5}{=} G\tau_S |\Phi_S\rangle \langle\Phi_S| \tau_S^\dagger G^\dagger + G\tau_D |\Phi_D\rangle \langle\Phi_D| \tau_D^\dagger G^\dagger \\ &= G\tau_S G_S^n \tau_S^\dagger G^\dagger + G\tau_D G_D^n \tau_D^\dagger G^\dagger \stackrel{(2.9)}{=} \underbrace{G\tau_S A_S \tau_S^\dagger}_{\Gamma_S} G^\dagger f_S + G \underbrace{\tau_D A_D \tau_D^\dagger}_{\Gamma_D} G^\dagger f_D \\ G^n &= A_1 f(E - \mu_S) + A_2 f(E - \mu_D) \end{aligned} \quad (2.21a)$$

$$G^n = G\Sigma^{in} G^\dagger, \quad (2.21b)$$

donde se define la *inscattering function* <sup>6</sup> como

$$\Sigma^{in} := \Sigma_S^{in} + \Sigma_D^{in}. \quad (2.22)$$

Nótese que la ecuación (2.21a) es válida para sistemas fuera del equilibrio, por la diferencia en  $\mu_S$  y  $\mu_D$ .

Puesto que tiene la suposición de que los electrones no interactúan (de forma electrostática) entre sí en el nanosistema, la función de correlación de éste sólo está dada por los electrones que los contactos intercambian al sistema (véase (2.21a)).

## 2.3. Corriente en sistemas abiertos

Para obtener la ecuación de la corriente en un sistema abierto, como lo es el caso de la figura 2.1, con el método NEGF descrito en la sección anterior, se recurre al operador de proyección  $|\psi\rangle \langle\psi|$  (estados de los electrones en el sistema, véase (2.12)). Considerando la ecuación de Schrödinger, la evolución temporal del operador de proyección sigue

$$\frac{d}{dt} |\psi\rangle \langle\psi| = \frac{1}{i\hbar} [H, |\psi\rangle \langle\psi|]. \quad (2.23)$$

Nótese que esta ecuación tiene la forma de una ecuación de continuidad, reflejando una conservación de densidad de probabilidad. Dado que el sistema está conectado a los reservorios, donde electrones salen y entran en todo momento de la conexión, la probabilidad no se puede conservar. Considerando transporte estacionario, la parte temporal de (2.23) se anula y el conmutador proporciona los electrones que entran y

<sup>4</sup>no confundir con las funciones espectrales  $A_{S/D} := G_{S/D} \Gamma_{S/D} G_{S/D}^\dagger$  que dan la densidad de estados de los electrones en los reservorios y no en el nanosistema

<sup>5</sup>Se usan las expresiones (2.17) y (2.16), y que  $|\Phi_{S/D}\rangle \langle\Phi_{D/S}| = 0$  porque no hay acoplamiento entre contactos.

<sup>6</sup>La *inscattering function* describe como se inyectan los electrones por los contactos.

## 2. FUNDAMENTOS DEL TRANSPORTE CUÁNTICO EN NANOSISTEMAS

---

salen del sistema, de tal forma que el operador de corriente se puede definir como

$$I^{op} := \frac{ie}{\hbar} [H, |\psi\rangle \langle \psi|] \stackrel{(2.8)}{=} \frac{ie}{h} [H, G^n], \quad (2.24)$$

donde  $e$  es la carga del electrón.

Los elementos de la diagonal del operador de corriente

$$I_{ii}^{op} = \frac{ie}{h} \sum_j (H_{ij} G_{ji}^n - G_{ij}^n H_{ji}), \quad (2.25)$$

describen la corriente total que fluye al  $i$ -ésimo sitio. De este modo, los elementos de la suma dan la corriente local que fluye entre el  $i$ -ésimo y el  $j$ -ésimo sitio:

$$I_{ij}^{loc} = \frac{ie}{h} (t_{ij} G_{ji}^n - t_{ji} G_{ij}^n) = \frac{2e}{h} \text{Im} (t_{ij}^* G_{ij}^n). \quad (2.26)$$

Así, la corriente total de electrones con energía  $E$  a través del sistema está dada por<sup>7</sup>

$$I(E) := \text{Tr} (I^{op}) = \frac{e}{h} \text{Tr} (\Sigma^{in} A - \Gamma G^m). \quad (2.29)$$

Como el flujo entrante de  $S$  y saliente a  $D$  de electrones en el nanosistema es el mismo, la corriente total es igual a cero; esto se puede observar de la definición del operador de corriente (2.24), tomando en cuenta la invariancia de la traza bajo permutaciones cíclicas. Por ello, para sólo calcular la corriente hacia el drenaje  $I_D$ , que es distinta de cero, basta con separar  $\Sigma^{in}$  y  $\Gamma$  en la contribución de cada contacto, de tal forma que se obtiene

$$I_D(E) := \frac{e}{h} \text{Tr} (\Sigma_D^{in} A - \Gamma_D G^m). \quad (2.30)$$

Al integrar sobre la energía, se llega a la formula de Landauer para la corriente a través del nanosistema

$$I_D := \int I_D(E) dE = \frac{e}{h} \int T_{DS}(E) (f(E - \mu_S) - f(E - \mu_D)) dE, \quad (2.31)$$

donde se define la *función de transmisión*

$$T_{DS} := \text{Tr} (\Gamma_D G \Gamma_S G^\dagger). \quad (2.32)$$

La función de transmisión  $T_{DS}$  da la probabilidad de que un electrón inyectado de la fuente  $S$  se transmita por el sistema al drenaje  $D$ , y depende de la energía  $E$  con la que el electrón es inyectado.

---

<sup>7</sup>El operador de corriente puede reescribirse como

$$[H, G^n] \stackrel{(2.21b)}{=} H G \Sigma^{in} G^\dagger - G \Sigma^{in} G^\dagger H \quad (2.27)$$

$$\stackrel{(2.18)}{=} G \Sigma^{in} - \Sigma^{in} G^\dagger + \underbrace{G \Sigma^{in} G^\dagger}_{G^n} \Sigma^\dagger - \Sigma \underbrace{G \Sigma^{in} G^\dagger}_{G^n} \quad (2.28)$$

donde  $\Sigma = \Sigma_S + \Sigma_D$  y  $\Gamma = \Gamma_S + \Gamma_D$ . Usando (2.19), (2.20) y la invariancia de la traza ante permutaciones cíclicas, se obtiene (2.28).

---

## Capítulo 3

# Grafeno y Heterouniones

---

Este capítulo está dedicado a la aproximación de las propiedades electrónicas del grafeno, usando la descripción del modelo de amarre fuerte a primeros vecinos, que exponen Foa-Torres *et. al* [17] y Castro Neto *et. al* [2]. Además, se hace la descripción del dopaje en nanocintas de grafeno y se introduce la Ley de Snell de Electrones (LSE) desde la aproximación semiclásica. Finalmente, se hace una descripción de los contactos usados en los cálculos numéricos presentados en este trabajo de investigación.

A lo largo del capítulo, se puntualiza la forma en que se generan las uniones *pn*, variando los parámetros de la LSE; además, se presenta el modelo de banda ancha para los contactos, y se hace la descripción detallada de cómo se inyectan los electrones a la nanocinta dopada por uno de sus bordes.

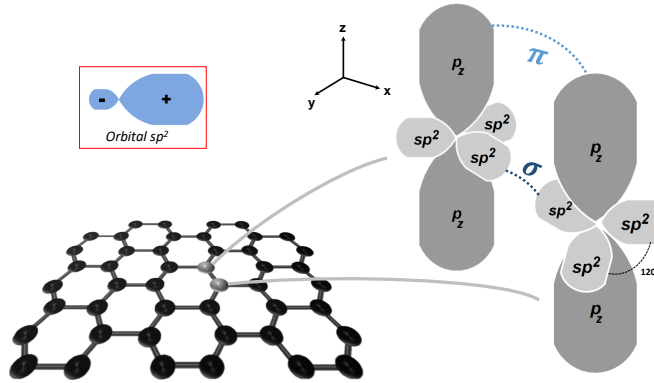
### 3.1. Características del grafeno

El grafeno es un material que está compuesto de átomos de carbono, donde la red tiene la estructura de *panal de abeja*. Por la estructura electrónica del carbono en el estado basal,  $1s^2 2s^2 2p^2$ , los orbitales  $2s$  y  $2p$  contienen cuatro electrones de valencia; aún más, el orbital  $2p$  contiene dos electrones no apareados. Sin embargo, el carbono puede maximizar el número de enlaces para reducir la energía del sistema, por lo que reorganiza los electrones de valencia en el estado excitado  $1s^2 2s^1 2p^3$ , produciendo una hibridación entre los orbitales  $2s$  y  $2p$ , que para el caso del grafeno se generan tres orbitales híbridos  $sp^2$  (combinando los orbitales  $s$ ,  $p_x$  y  $p_y$ ) y un orbital  $2p$  puro (orbital  $p_z$ ), donde cada orbital resultante alberga un electrón de valencia [18]. Por un lado, al combinarse los orbitales  $s$ ,  $p_x$  y  $p_y$  y producirse los orbitales  $sp^2$ , dichos orbitales  $sp^2$  se traslapan a primeros vecinos formando enlaces frontales denominados *enlaces tipo  $\sigma$* ; ya sean enlaces  $\sigma$  (enlazante) o  $\sigma^*$  (antienlazante). Por otro lado, el traslape entre orbitales  $p_z$  paralelo a primeros vecinos produce *enlaces tipo  $\pi$* ; ya sea enlaces  $\pi$  (enlazante) o  $\pi^*$  (antienlazante).

Los orbitales  $sp^2$  se mantienen en el plano de la hoja de grafeno, y tienen entre sí

### 3. GRAFENO Y HETEROUNIONES

un ángulo de  $120^\circ$ ; el ángulo entre estos orbitales da la estructura de red de panal. El orbital  $2p_z$  es perpendicular a la hoja de grafeno. Véase la figura 3.1 donde se muestra la posición de los orbitales de un átomo en grafeno y los enlaces entre orbitales de vecinos. Los enlaces  $\sigma$  son enlaces covalentes muy fuertes, y por ello se determina la estabilidad y las propiedades elásticas de la red del grafeno. Los enlaces  $\pi$  son más débiles que los enlaces  $\sigma$ . Como la brecha energética entre las bandas  $\sigma$  y  $\sigma^*$  es muy grande alrededor de la energía de Fermi (véase figura 4a en [19]), se desprecian estos enlaces en la descripción de las propiedades electrónicas; por ello, en el transporte electrónico sólo se trabaja con los orbitales  $p_z$  (enlaces  $\pi$ ). Los enlaces  $\pi$  y  $\pi^*$  dan lugar a una banda de valencia y a otra de conducción, que se unen en los *puntos de Dirac*, en la energía de Fermi para el grafeno homogéneo<sup>1</sup> (no dopado).



**Figura 3.1:** Orbitales para los átomos del grafeno. Los orbitales  $sp^2$  se mantienen en el plano, y hay entre ellos un ángulo de  $120^\circ$ , mientras que el orbital  $p_z$  es perpendicular a la hoja de grafeno. El traslape de los orbitales  $sp^2$  forman enlaces tipo  $\sigma$  (dados por la hibridación de los orbitales  $s$ ,  $p_x$  y  $p_y$ ), y el traslape de los orbitales  $p_z$  paralelo a primeros vecinos forman enlaces tipo  $\pi$ . En el recuadro rojo se presenta la forma del orbital híbrido  $sp^2$ .

Figura modificada de [17, fig. 2.1a].

#### 3.1.1. Red de grafeno

Los átomos de carbono en el grafeno se acomodan en una red hexagonal, comúnmente llamada red de panal de abeja, como se muestra en la figura 3.2a. Esta estructura se describe matemáticamente por una red triangular con dos átomos en la celda unitaria ( $A$  y  $B$ ) y una base dada por  $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2\}$ :

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a_0}{2} (3, \sqrt{3}), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a_0}{2} (3, -\sqrt{3}), \quad (3.1)$$

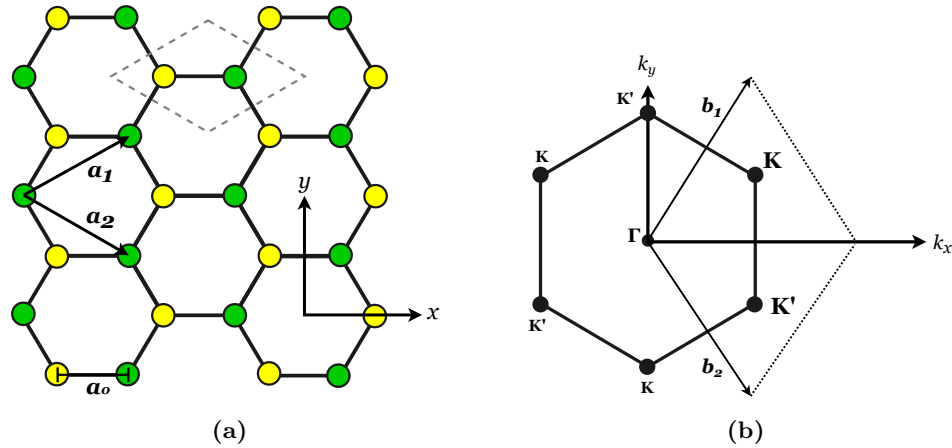
donde  $a_0 \equiv 1.42 \text{ \AA}$  es la distancia entre átomos en el grafeno [2, 17]. Como hay dos átomos en la celda unitaria, cada tipo de átomo forma una subred triangular, como

<sup>1</sup>Por la forma de la estructura de bandas, también se puede llamar grafeno neutro. Véase figura 3.3.

se observa en la figura 3.2a, donde los átomos amarillos forman una subred  $A$  y los verdes la subred  $B$ . Dados los vectores de la red real, los vectores de la red recíproca del grafeno están dados por  $\{\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2\}$ <sup>2</sup>:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a_0} \left(1, \sqrt{3}\right), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a_0} \left(1, -\sqrt{3}\right). \quad (3.2)$$

En la figura 3.2b se muestra la (primera) zona de Brillouin (BZ) con los vectores de la red recíproca. Obsérvese que la red recíproca también es hexagonal, y está rotada  $90^\circ$  respecto a la red real.



**Figura 3.2:** En (a) se muestra la red real del grafeno, que es una red hexagonal bidimensional, con  $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2\}$  como vectores de la base y la celda unitaria en línea gris punteada. Los puntos verdes y amarillos forman una subred triangular de forma independiente. La distancia entre átomos está dada por  $a_0 = 1.42 \text{ \AA}$ . En (b) se muestra la BZ para el grafeno, que también es hexagonal; los vectores de la red recíproca son  $\{\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2\}$ , y los puntos  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  se encuentran en las esquinas de la BZ.

Las esquinas en la BZ tienen una importancia en la física del grafeno, dado que son puntos de alta simetría. De las seis esquinas, sólo dos son no equivalentes (las otras se pueden escribir usando estos puntos y vectores de la red recíproca), que se denotan como  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$ . Para este caso estos puntos también se llaman valles o *puntos de Dirac*<sup>3</sup> (por razones que se aclaran más adelante). En el espacio de los momentos, se definen los puntos  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  como

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{3a_0} \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right), \quad \mathbf{K}' = \frac{2\pi}{3a_0} \left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right). \quad (3.3)$$

<sup>2</sup>Se usa la condición  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$  entre los vectores de la red real y la red recíproca.

<sup>3</sup>No siempre coinciden los puntos de Dirac con los puntos de simetría  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$ , pues cuando hay deformaciones, estos puntos no concuerdan [20, 21].

### 3.1.2. Hamiltoniano para grafeno

De la figura 3.2a es sencillo ver que los primeros vecinos de un átomo de la subred  $A$  ( $B$ ) son parte de la subred  $B$  ( $A$ ). Teniendo en cuenta que se hace la descripción de amarre fuerte a primeros vecinos y que para el transporte cuántico en grafeno sólo se consideran los orbitales  $p_z$ , desde (2.1) se tiene que el Hamiltoniano para el grafeno está dado por

$$H = \sum_{i,\alpha} \varepsilon_i |P_i^\alpha\rangle \langle P_i^\alpha| - t \sum_{\langle i,j \rangle} (|P_i^A\rangle \langle P_j^B| + H.c.) , \quad (3.4)$$

donde  $|P_i^\alpha\rangle$  es el estado normalizado (por el número de celdas unitarias) en el orbital  $p_z$  del  $i$ -ésimo sitio de la subred  $\alpha \in \{A, B\}$ ,  $\langle i, j \rangle$  denota los primeros vecinos (con  $t = 2.8 \text{ eV}$  [2, 12] como parámetro de acoplamiento) y  $\varepsilon_i$  es la *energía de sitio*, que jugará un papel importante en el grafeno dopado.

### 3.1.3. Propiedades electrónicas de las nanocintas de grafeno

Para obtener el espectro energético (como es la energía en función del momento en el espacio recíproco) del grafeno homogéneo, es decir, que no está dopado ( $\varepsilon_i = 0$  para todos los sitios en (3.4)), se debe encontrar una solución para la ecuación de Schrödinger. De acuerdo con el *teorema de Bloch*, la eigenfunción evaluada en la red periódica en las posiciones  $\mathbf{R}_i$  y  $\mathbf{R}_j$  difieren por un factor de fase  $e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}$ . Puesto que hay dos átomos en la base del grafeno, se hace el *ansatz*

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} (c_A |P_m^A\rangle + c_B |P_m^B\rangle) , \quad (3.5)$$

donde  $\mathbf{R}_m$  es un punto en la red del grafeno y  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  es el vector de onda, que se limita a la BZ. Considerando que los orbitales cercanos no se superponen, entonces se cumple que  $\langle P_i^\alpha | P_j^\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij}$  ( $\alpha, \beta = A, B$ ). Así, usando esta relación de ortogonalidad en la ecuación de Schrödinger, al multiplicar  $\langle P_i^\alpha |$  por la izquierda, se tiene el problema de eigenvalores

$$\begin{pmatrix} 0 & H_{AB}(\mathbf{k}) \\ H_{AB}^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix} = E(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix} , \quad (3.6)$$

donde al considerar los tres primeros vecinos se tiene que [12]

$$H_{AB}(\mathbf{k}) = -te^{3ik_x a_0} \left[ 1 + 2e^{-i3k_x a_0/2} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_y a_0\right) \right] . \quad (3.7)$$

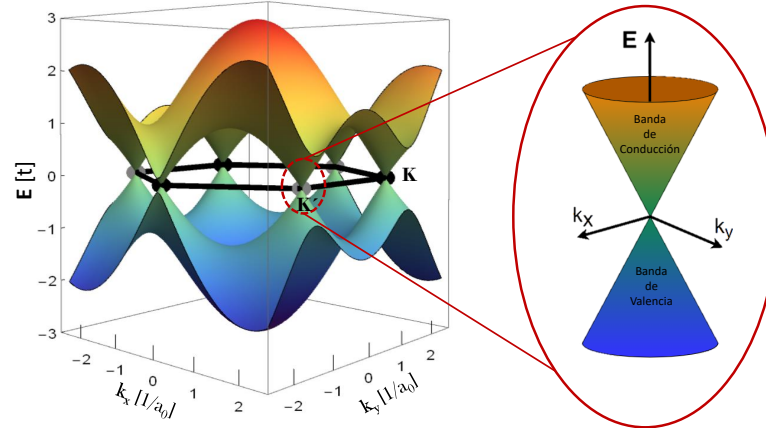
La relación de dispersión energética se obtiene al diagonalizar la matriz correspondiente del Hamiltoniano en (3.6), haciendo el determinante cero. De este modo, se

obtienen las eigenenergías [2, 12, 19, 22]

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm t \left[ 3 + 2 \cos(\sqrt{3}k_y a_0) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a_0\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x a_0\right) \right]^{1/2}. \quad (3.8)$$

En esta expresión, el signo negativo corresponde a la banda  $\pi$  y el positivo a la banda  $\pi^*$ . Se verifica que para ambas bandas, en los puntos  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  la energía es cero,  $E(\mathbf{k} = \mathbf{K}) = E(\mathbf{k} = \mathbf{K}') = 0$ , siendo también estos puntos donde ambas bandas se tocan. En la figura 3.3 se muestra la relación de dispersión (3.8) en la BZ. Estos resultados fueron presentados por primera vez en 1947 por Wallace [22].

Dado que por cada átomo en la red de grafeno (homogéneo) se consideró un orbital  $p_z$  por átomo, entonces la banda  $\pi$  está llena mientras que la  $\pi^*$  se encuentra vacía, por lo que la energía de Fermi entre las dos bandas es  $E_F = 0$ . Así, la banda positiva corresponde a la banda de conducción y la banda negativa a la de valencia<sup>4</sup> (véase la figura 3.3).



**Figura 3.3:** Relación de dispersión (3.8) para el grafeno. La zona de Brillouin se ilustra por líneas negras. La banda positiva y la banda negativa son simétricas, respecto a la energía de Fermi  $E_F = 0$ , donde dichas bandas se cruzan. En esta relación de dispersión, la banda de valencia es la negativa y la banda de conducción es la positiva. Se hace un acercamiento de la relación de dispersión cerca de los puntos  $\mathbf{K}$  (puntos negros) y  $\mathbf{K}'$  (puntos grises), donde se ilustran los conos de Dirac. Figura modificada de [12, fig. 5.16a].

#### 3.1.4. Electrones de Dirac

Centrando el estudio en los puntos de Dirac, donde las bandas de valencia y conducción se tocan (véase figura 3.3), se toman en cuenta los vectores cercanos al punto  $\mathbf{K}$  (o  $\mathbf{K}'$ ), de tal forma que  $\mathbf{q} := \mathbf{k} - \mathbf{K} \ll 1$  ( $\mathbf{q} := \mathbf{k} - \mathbf{K}'$ ). Haciendo una expansión de Taylor de la relación de dispersión (3.8) alrededor de los puntos  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  (véanse las

<sup>4</sup>Por ello, también puede referirse al grafeno homogéneo ( $\varepsilon_i = 0$ ) como grafeno neutro.



### 3. GRAFENO Y HETEROUNIONES

---

definiciones (3.3)), se obtiene que

$$E_{\pm}(\mathbf{q}) = \pm \hbar v_F |\mathbf{q}|, \quad (3.9)$$

donde  $v_F$  es la *velocidad de Fermi*, definida por

$$v_F := \frac{3a_0 t}{2\hbar} \approx 10^6 \text{ m/s}. \quad (3.10)$$

La relación de dispersión obtenida alrededor de los puntos de Dirac es lineal y simétrica respecto al nivel de Fermi.

Las propiedades electrónicas alrededor de los valles  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  imitan a las propiedades que tienen los fermiones relativistas (o de Dirac) sin masa, formando los *conos de Dirac*. Los fermiones relativistas tienen una “velocidad de la luz efectiva” de  $10^6$  m/s [19], que es dos órdenes de magnitud más pequeña que la velocidad de la luz  $c$ . Es por ello que se puede hacer una descripción efectiva cerca de los puntos de Dirac, a la que se llamará *la aproximación de Dirac*.

Para hacer la descripción de Dirac se hace una expansión de (3.7) alrededor de los puntos de Dirac  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$ , llegando a que

$$H_{AB} \approx -\hbar v_F (iq_x \pm q_y), \quad (3.11)$$

donde el signo positivo corresponde alrededor del punto  $\mathbf{K}$  y el negativo alrededor del punto  $\mathbf{K}'$ . Con esta expresión se obtienen los siguientes Hamiltonianos efectivos cerca de los puntos de Dirac:

$$H_{\mathbf{K}} = -\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & iq_x + q_y \\ -iq_x + q_y & 0 \end{pmatrix}, \quad H_{\mathbf{K}'} = -\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & iq_x - q_y \\ -iq_x - q_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

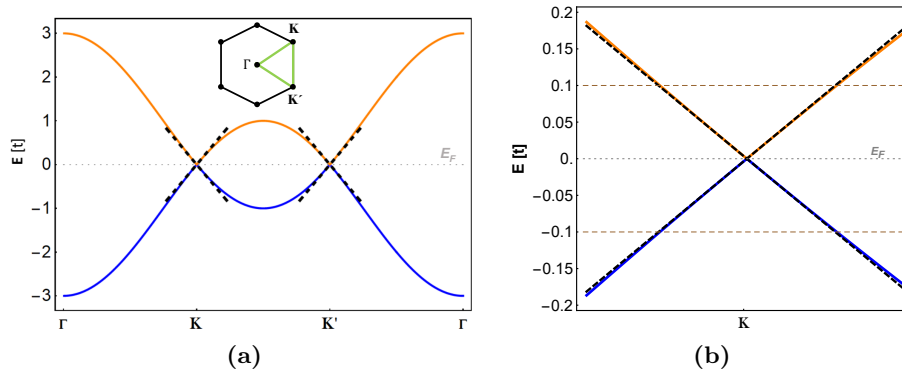
La relación de dispersión lineal (3.9) corresponde a las eigenenergías de los Hamiltonianos efectivos  $H_{\mathbf{K}/\mathbf{K}'}$ . Los eigenestados para los Hamiltonianos (3.12) están dados como

$$|\psi_{\mathbf{K},s}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -se^{-i\theta_q} \end{pmatrix} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad |\psi_{\mathbf{K}',s}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\theta_q} \end{pmatrix} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad (3.13)$$

donde  $s = \pm 1$  es el *índice de banda*:  $s = +1$  es para la banda de conducción y  $s = -1$  es para la banda de valencia; además,  $\theta_q = \arg(iq_x + q_y)$  es la fase entre las subredes  $A$  y  $B$ . Estos eigenestados se obtienen a partir de poder escribir el Hamiltoniano (3.12) en términos de las matrices de Pauli y el momento angular [2, 17]. Como los eigenestados son vectores de dos componentes, donde cada entrada da la amplitud de la subred  $A$  y  $B$ , se introduce el término de *pseudoespín* de subred; en grafeno aparece además el pseudoespín de valle (que está relacionado con la polaridad respecto a los puntos  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$ ). Así, el pseudoespín de subred es el biespinor de los eigenestados (3.13).

En la figura 3.4 se presenta la relación de dispersión (3.8) para la trayectoria de líneas rectas entre los puntos  $\Gamma$ ,  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  de la BZ, y también se muestra la relación de dispersión lineal (3.9) alrededor de los puntos de Dirac, donde cerca de estos puntos la relación de dispersión lineal es muy similar a la relación de dispersión calculada con el

Hamiltoniano de amarre fuerte. En la figura 3.4b se hace un acercamiento alrededor del punto  $\mathbf{K}$  (el acercamiento es equivalente alrededor del punto  $\mathbf{K}'$ ), donde se muestra que cuando se trabaja con energías de  $0.1t$  por encima o por debajo de la energía de Fermi, la aproximación de Dirac es completamente válida; es importante tomar en cuenta esto al trabajar con grafeno dopado, como se expondrá más adelante, pues así se asegura que se tienen fermiones relativistas que se describen con un Hamiltoniano de Dirac<sup>5</sup>.



**Figura 3.4:** Relación de dispersión entre los puntos  $\Gamma$ ,  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  en la BZ. Las curvas azul y naranja corresponden a las bandas de valencia y conducción, respectivamente. Se indica la energía de Fermi, así como la relación de dispersión lineal alrededor de los puntos de Dirac, en línea discontinua negra. En la parte superior de (a) se muestran las líneas rectas entre los puntos (en verde); figura modificada de [12, fig. 5.16b]. En (b) se realiza un acercamiento sobre el punto  $\mathbf{K}$ , donde se observa que las relaciones de dispersión (3.8) y (3.9) son muy similares para energías en  $[-0.1t, 0.1t]$ .

## 3.2. Heterouniones en grafeno

El tamaño de las nanocintas tratadas en este estudio es de  $170\text{nm} \times 200\text{nm}$ . Debido a que la longitud de camino libre medio para el grafeno es de  $1\ \mu\text{m}$  a temperatura ambiente, entonces el transporte de electrones es balístico [24, 25]. Por ello, se pueden describir las trayectorias de los electrones como rayos. Esto permite que en las heterouniones con grafeno se pueda observar una analogía con la óptica. Una de las primeras utilidades que se vieron aprovechando esta analogía fue realizar lentes de Veselago, que requieren de índices de refracción negativos, y también lentes super-divergentes [4, 5]. Con una interfaz suave en grafeno mediante un potencial electrostático externo, se han podido proponer colimadores de haces de electrones [6] y realizar de forma experimental guías de haces de electrones [7], por mencionar algunos ejemplos. La idea consiste en poner

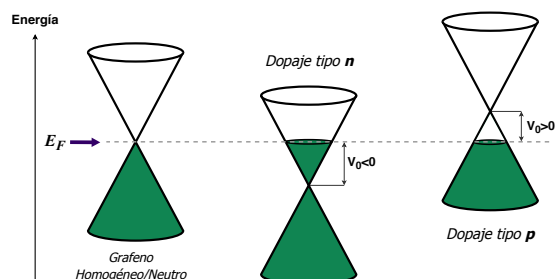
<sup>5</sup>En este contexto, un Hamiltoniano de Dirac es el que describe partículas relativistas con espín semientero. La teoría de Dirac es la primera que involucró a la relatividad especial en la mecánica cuántica. [23]

compuertas a cada región que se quiera dopar, de forma que dicho voltaje genere un dopaje, elevando o bajando el nivel de Fermi de la nanocinta de grafeno (véase figura 1.1). Recientemente, se ha logrado un potencial abrupto en el grafeno [10], al que se le denomina de perfil atómico (*atomically sharp* en inglés).

#### 3.2.1. Dopaje tipo n y p en grafeno

En el estudio del grafeno dopado, los trabajos están realizados principalmente mediante dos métodos: modificación química y ajuste por potencial electrostático [11]. El primer método se realiza introduciendo átomos de diversos elementos o compuestos, ya sea absorbiéndolos o sustituyéndolos en las cintas de grafeno; esto produce una brecha de la estructura de bandas. Usando un potencial electrostático, se utilizan compuertas de voltaje para generar el dopaje, y no se produce brecha energética en los conos de Dirac. En esta tesis se estudia el grafeno dopado a partir de un potencial electrostático.

El nivel de Fermi para el grafeno homogéneo queda en los puntos de Dirac, donde se tocan las bandas de valencia y conducción (véase figura 3.3). Usando un potencial electrostático es posible ajustar el nivel de Fermi para hacer un dopaje tipo *n* o *p*. Aumentando el nivel de Fermi sobre el punto de Dirac a la banda de conducción, se obtiene un dopaje tipo *n*; por el contrario, al disminuir el nivel de Fermi a la banda de valencia, se obtiene un dopaje tipo *p*. En la figura 3.5 se muestra el nivel de Fermi en los conos de Dirac, comparado con el grafeno homogéneo, tratado en la sección anterior.



**Figura 3.5:** Tipos de dopaje. Para el grafeno homogéneo se muestra que el nivel de Fermi (indicado con línea discontinua gris, se ilustra en verde los estados ocupados) está situado en la unión de las bandas de valencia (cono inferior) y conducción (cono superior). Para el dopaje tipo *n*, el nivel de Fermi aumenta sobre el punto de Dirac y se mantiene en la banda de conducción. Para el dopaje tipo *p*, contrario al dopaje *n*, el nivel de Fermi disminuye bajo el punto de Dirac y se mantiene en la banda de valencia.  $V_0$  es el potencial electrostático aplicado para dopar el grafeno (sea dopaje tipo *n* o tipo *p*).

Aplicando un potencial electrostático  $V_0$  constante al grafeno homogéneo, se obtiene el dopaje: si  $V_0$  es positivo se tiene un dopaje tipo *p*, y si es negativo un tipo *n*. El ajuste por el potencial electrostático en el nivel de Fermi está dado precisamente por el valor del potencial  $V_0$  (positivo o negativo según el caso), como se observa en la figura

3.5. Por ello, la aplicación de  $V_0$  es equivalente a cambiar el cero de la energía, y el Hamiltoniano cerca de los puntos de Dirac queda dado por

$$H_{\mathbf{K}}^d = \hbar v_F \begin{pmatrix} V_0 & -iq_x - q_y \\ iq_x - q_y & V_0 \end{pmatrix}, \quad H_{\mathbf{K}'}^d = \hbar v_F \begin{pmatrix} V_0 & -iq_x + q_y \\ iq_x + q_y & V_0 \end{pmatrix}, \quad (3.14)$$

donde  $V_0$  puede ser un potencial por partes (véase figura 3.6), como lo presentan Allain y Fuchs en [26]. Las eigenenergías de este Hamiltoniano están dadas por  $E_{\pm}^d = V_0 + E_{\pm}$ , donde  $E_{\pm}$  está dada por (3.9) para vectores de onda cercanos a los puntos de Dirac; sus eigenestados siguen siendo los estados de (3.13).

Puesto que se hace la consideración de las energías de sitio  $\varepsilon_i = 0$  para todos los sitios en grafeno neutro, la forma de implementar el grafeno dopado con el Hamiltoniano de amarre fuerte es asignar un potencial local  $\varepsilon_i = V_0$  en (3.4), como lo hace Naumis en [27] simulando dopaje por impurezas. Esto permite que en grafeno dopado el nivel de Fermi  $E_F$  cambie respecto a los puntos de Dirac, dependiendo del signo y magnitud del potencial de dopaje  $V_0$ .

Un *hueco* (*hole* en inglés) es la ausencia de un electrón en una banda llena, por lo que tiene una carga positiva, además de tener el momento  $\mathbf{q}$  opuesto al electrón. Dado que en la región tipo  $p$  el nivel de Fermi se encuentra en la banda de valencia, es importante decir que el electrón en la región  $p$  no se convierte a un hueco [26].

### 3.2.2. Unión $pn$ : Potencial abrupto y potencial suave

En la óptica geométrica, la propagación de las ondas, que pueden representar fotones o electrones, se describen como trayectorias de partículas puntuales. Esta aproximación es válida cuando se cumple la condición

$$a_0 \ll \lambda_F, \quad (3.15)$$

donde  $a_0 = 0.142$  nm es la distancia entre átomos en la red del grafeno (véase figura 3.2a) y  $\lambda_F$  es la longitud de onda asociada a los electrones inyectados con energía  $\mu$  (véase ecuación (3.32)), que está en el orden de  $10^2$  nm.

Como ya se mencionó en la sección anterior, el potencial de dopaje  $V_0$  puede ser por partes, para formar distintos tipos de uniones ( $pn$ ,  $pp'$ ,  $nn'$ ). Si la interfaz de la unión tiene un ancho  $w_{int}$ , entonces se tiene que:

- El potencial abrupto cumple al condición  $\lambda_F \gg w_{int}$ .
- El potencial suave se tiene cuando  $\lambda_F \ll w_{int}$ .

En la figura 3.6 se muestra el perfil del potencial para ambos tipos de interfaz. En el espacio recíproco, la distancia entre los valles es  $|\mathbf{K} - \mathbf{K}'| \sim 1/a_0$ . Un potencial suave sólo puede causar cambios  $\Delta\mathbf{k} \sim 1/w_{int} \ll 1/a_0$  en el espacio de momentos, por lo que no puede causar dispersión entre los valles [26]. Un potencial abrupto ( $w_{int} \sim a_0$ ) puede generar grandes cambios  $\Delta\mathbf{k} \sim 1/a_0$ , por lo que es posible la dispersión entre los

### 3. GRAFENO Y HETEROUNIONES

---

valles; sin embargo, este estudio queda fuera del alcance de esta tesis, y se deja como trabajo a futuro.

Concentrándose en la descripción en las uniones  $pn$ , como la que se muestra en la figura 1.1, el potencial de dopaje  $V_0$  es considerado con invariancia traslacional en la dirección  $y$ , de modo que sólo varía respecto a la coordenada  $x$ . Se asume que es infinitesimalmente pequeño el voltaje *bias* que se aplica entre las terminales (como en la figura 1.1) para que se produzca el transporte electrónico y por ende, se estudia el flujo de electrones que se inyecta con una energía fija  $\mu$  por el contacto fuente  $S$ .

Un fenómeno de transporte sobresaliente en las heterouniones de grafeno es la *ausencia de retrodispersión* cuando se tienen incidencia normal a la interfaz de la unión [26, 28]. Para explicar esto, se retoma el concepto de pseudoespín de subred, que corresponde al biespinor de los eigenestados (3.13), y representa la distribución de los eigenestados en las subredes A y B. Dado que el pseudoespín está caracterizado por el valor de  $\theta_q = \arctan(q_x/q_y)$ , este ángulo es el que diferencia el valor de las componentes del biespinor y por ello puede denominarse como el pseudoespín. Una onda electrónica con incidencia normal tiene como componentes del vector de onda  $q_x > 0$  y  $q_y = 0$ , por lo que tiene pseudoespín de  $\theta_q = \pi/2$ ; una onda reflejada en dirección opuesta a la incidente tiene como componentes  $q_x < 0$  y  $q_y = 0$  y su pseudoespín es  $\theta_q = -\pi/2$ . Así, el pseudoespín de la onda reflejada es opuesto al de la onda incidente. Además, el potencial de dopaje  $V_0$  que se aplica a la nanocinta es simétrico en el espacio de la subred, es decir, actúa de la misma forma en ambas subredes, como se observa en los Hamiltonianos (3.14). Por ende, el potencial no puede modificar el pseudoespín de subred. De este modo, no es posible que exista la onda reflejada, por lo que no hay retrodispersión.

Considerando un potencial abrupto, como en la figura 3.6a, el potencial es constante en cada región (con valor  $n$  en la región  $n$  y valor  $p$  en la región  $p$ ) y en la interfaz el potencial cambia en forma de escalón ( $w_{int} \sim a_0$ ). Para este caso se considera  $\mu > 0$ , lo que permite poner el valor del potencial de dopaje de la región  $n$  en cero.

Para el caso del potencial suave, la nanocinta se divide en tres regiones: la región  $n$ , la región de interfaz y la región  $p$ . Para las regiones  $n$  y  $p$ , el valor del dopaje es constante, mientras que en la interfaz el potencial de dopaje aumenta linealmente, como se muestra en la figura 3.6b. Se considera que el potencial suave aumenta linealmente porque es sencillo hacer una descripción analítica [6, 26] y se es usado en experimentos [24]. Considerando un dopaje simétrico<sup>6</sup>, justo en la parte central de la interfaz el potencial toma el valor de la energía  $\mu$ , y la región de interfaz se puede dividir en dos regiones ( $V_0 < \mu$  y  $V_0 > \mu$ ) con ancho  $w$  ( $w_{int}$  es el ancho total de la interfaz). Con lo dicho anteriormente, para estar en el régimen de potencial suave, es necesario que se

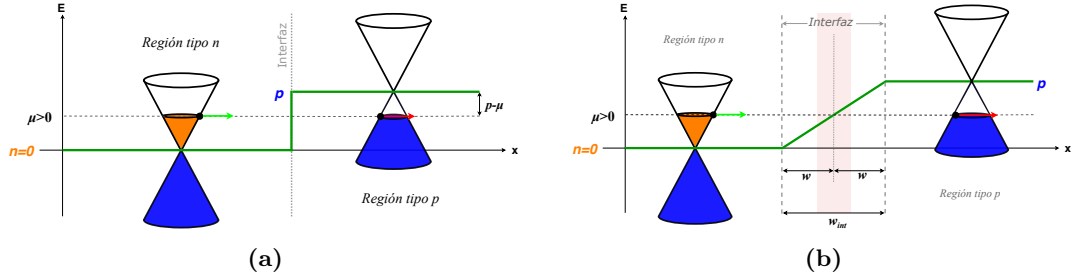
---

<sup>6</sup>Si el valor del potencial de dopaje en la región tipo  $n$  y tipo  $p$  es  $n$  y  $p$ , respectivamente, un potencial simétrico es cuando las diferencias  $\mu - n$  y  $p - \mu$  son iguales.

cumpla la condición

$$\lambda_F \ll w, \quad (3.16)$$

como lo presentan Cheianov y Fal'ko en [6].



**Figura 3.6:** Esquema del potencial de dopaje de una unión  $pn$  en el espacio real. Se considera una energía de Fermi  $\mu > 0$ .  $n$  y  $p$  representan el valor constante del potencial de dopaje  $V_0$  (en línea verde) para las regiones  $n$  y  $p$ , respectivamente. Se presenta la propagación de los electrones con flechas verdes (banda de conducción) y rojas (banda de valencia). (a) representa un potencial abrupto, que cambian de forma escalonada entre regiones. En (b) se presenta un potencial suave con un dopaje simétrico, con una región de la interfaz de ancho  $w_{int}$  donde el potencial incrementa de forma lineal del valor  $n$  a  $p$ . La línea punteada en la interfaz marca la parte media de la interfaz, donde el valor del potencial es  $\mu$ . Figura modificada de [26, figs. 2, 6].

### 3.2.3. Ley de Snell de electrones (LSE)

En una unión  $pn$  se puede describir la propagación electrónica dentro de un esquema semiclassical, similar a la óptica geométrica de rayos [29]. De este modo, se puede tratar la propagación de los electrones en la unión  $pn$  como un haz de luz propagándose en dos medios distintos.

Considerando la energía de inyección  $\mu > 0$  como en la figura 3.6, se tiene que  $n < \mu < p$ . Un electrón incidente a la interfaz entre las regiones  $n$  y  $p$ , se puede describir con un vector  $\mathbf{q}_i$ , que hace un ángulo  $\theta$  con la normal a la interfaz (en este caso, paralela al eje  $x$ ); este electrón incidente puede reflejarse en la misma región  $n$  o transmitirse a la región  $p$ . Si se transmite a la región  $p$ , puesto que el electrón ahora está en la banda de valencia, el vector de onda y la velocidad de grupo son contrarias (véase figura 3.7); esto da lugar a una refracción anómala: *refracción negativa*<sup>7</sup>.

El electrón reflejado tiene un vector de onda  $\mathbf{q}_r$ , que forma un ángulo  $\theta_r = -\theta$  (por conservación de momento) con la normal a la interfaz. El electrón transmitido tiene un vector de onda  $\mathbf{q}_t$ , haciendo un ángulo  $\phi$  con la normal a la interfaz. En la figura 3.7 se

<sup>7</sup>Tomando como referencia la refracción de la luz entre dos medios, donde el rayo está por un lado de la normal a la superficie y pasa al lado opuesto de ésta al pasar al otro medio, en la refracción negativa el rayo se mantiene del mismo lado de la interfaz en ambos medios.

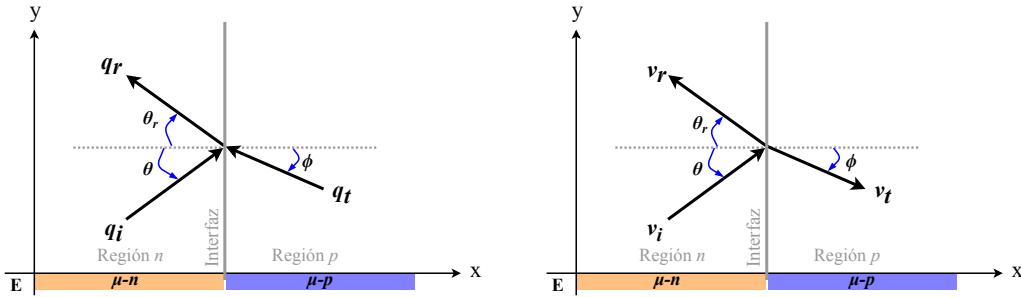
### 3. GRAFENO Y HETEROUNIONES

muestra el esquema de ángulos para la reflexión y transmisión por el ángulo incidente. De la figura, los vectores incidente, reflejado y transmitido están dados a partir de la interfaz como

$$\mathbf{q}_i = (q_x, q_y) = \frac{\mu - n}{\hbar v_F} (\cos \theta, \text{sen} \theta) , \quad (3.17a)$$

$$\mathbf{q}_r = (-q_x, q_y) = \frac{\mu - n}{\hbar v_F} (-\cos \theta, \text{sen} \theta) , \quad (3.17b)$$

$$\mathbf{q}_t = (q'_x, q'_y) = \frac{\mu - p}{\hbar v_F} (-\cos \phi, \text{sen} \phi) . \quad (3.17c)$$



**Figura 3.7:** Electrón con energía  $\mu$  que incide en una interfaz de una unión  $pn$ . A la izquierda se presentan los vectores de onda y a la derecha las velocidades de grupo; note el cambio de dirección en la región  $p$ . El vector de onda incidente es  $\mathbf{q}_i$ , el reflejado es  $\mathbf{q}_r$  y el transmitido es  $\mathbf{q}_t$ ; con los mismos subíndices se señalan las velocidades. Se indican en las figuras las direcciones de los vectores y de los ángulos (positivos en sentido horario). Figuras modificadas de [26, fig. 4] (izq.) y [29, fig. 10.13] (der.).

Al transmitirse, la invariancia traslacional del sistema en la dirección  $y$  lleva a la conservación del momento en  $y$  [29]; esta conservación del momento implica que  $q_y = q'_y$ , y permite llegar a una relación entre los ángulos  $\theta$  y  $\phi$ :

$$(\mu - n) \text{sen} \theta = (\mu - p) \text{sen} \phi . \quad (3.18)$$

Considerando los perfiles de potencial de dopaje de la figura 3.6, donde la energía de Fermi  $\mu > 0$  y  $n = 0$ , se tiene la siguiente relación entre ángulos

$$\frac{\text{sen} \theta}{\text{sen} \phi} = \frac{\mu - p}{\mu} . \quad (3.19)$$

La expresión (3.18), y concretamente para esta tesis la expresión (3.19), se denomina la *ley de Snell de electrones* (LSE), por ser la análoga a la ley de Snell en óptica geométrica. En la LSE, los que juegan los papeles de índice de refracción, son las diferencias de potencial:  $\mu$  y  $\mu - p$ . Como  $\mu - p < 0$ , el fenómeno de la refracción

negativa surge. La condición de ángulo crítico<sup>8</sup> a partir de la LSE está dado por

$$\theta_c = \arcsen\left(\frac{p - \mu}{\mu}\right). \quad (3.20)$$

Para conocer cuál es la probabilidad de que se transmita el electrón entre las regiones, se recurre a los eigenestados del Hamiltoniano de Dirac (3.13) encontrados en la subsección Electrones de Dirac. Considerando sólo un valle en la descripción de electrones de Dirac, de la figura 3.6 se tiene que la función de onda en la región  $n$  es  $|\psi_I\rangle$ , compuesta por el electrón incidente y reflejado, y en la región  $p$  es  $|\psi_{II}\rangle$ , donde estas funciones están dadas como

$$|\psi_I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{iq_y y} \left[ e^{iq_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\theta} \end{pmatrix} - r e^{-iq_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{+i\theta} \end{pmatrix} \right], \quad (3.21a)$$

$$|\psi_{II}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}t e^{iq_y y} e^{iq_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ +e^{-i\phi} \end{pmatrix}, \quad (3.21b)$$

ya aplicando la LSE, siendo  $r$  y  $t$  las amplitudes de probabilidad de reflexión y transmisión.

Por la discontinuidad en la interfaz se usa la condición de frontera y la conservación de corriente  $|\psi_I\rangle|_{\text{int}^-} = |\psi_{II}\rangle|_{\text{int}^+}$  [4, 26], obteniendo que  $r + t = 1$  y que los coeficientes semiclásicos de transmisión ( $T$ ) y reflexión ( $R$ ) están dados por

$$T = \frac{\cos \phi}{\cos \theta} |t|^2 = \frac{\cos \theta \sin \phi}{\cos^2\left(\frac{\theta + \phi}{2}\right)}, \quad (3.22a)$$

$$R = |r|^2 = \frac{\sin^2\left(\frac{\theta + \phi}{2}\right)}{\cos^2\left(\frac{\theta + \phi}{2}\right)}. \quad (3.22b)$$

El coeficiente de transmisión para el potencial suave con dopaje simétrico es tratado por Cheianov y Fal'ko en [6]; a continuación, se dará una breve explicación de su deducción.

Siendo el vector de onda incidente  $\mathbf{q}_i = (q_x, q_y)$ , si  $q_y = 0$  (incidencia normal,  $\theta = 0$ ) la transmisión es total por ausencia de retrodispersión. Si  $q_y \neq 0$  ( $\theta \neq 0$ ), entonces  $q_y$  es constante por la invariancia traslacional en  $y$ . Cerca de la mitad de la interfaz ( $E = \mu$ ) hay una zona clásicamente prohibida (zona sombreada en rojo claro en la figura 3.6), donde los electrones pasan a través de ella mediante ondas evanescentes ( $q_x(x) \rightarrow i\kappa(x)$ ). Al considerar la amplitud de probabilidad del tunelaje a través de ondas evanescentes y usando la aproximación (3.16), se llega a que el coeficiente de transmisión para el potencial suave está dado por [6, 26]

$$T(\theta) = e^{-\pi(k_F w)\sin^2\theta}, \quad (3.23)$$

<sup>8</sup>El ángulo crítico es aquel ángulo de incidencia a partir del cual la transmisión de corriente entre las regiones es nula, o de otra forma, toda la corriente se refleja.



donde  $k_F$  es el vector de onda de Fermi asociado a los electrones incidentes y  $w = w_{int}/2$  es el ancho de la región de la interfaz que tiene el potencial de dopaje sobre (o debajo) del nivel de Fermi (véase figura 3.6b).

#### 3.2.4. Simulación de uniones $pn$

A continuación se hace la descripción detallada de la simulación de una nanocinta dopada, de tal forma que se hace una unión  $pn$ , tanto con potencial abrupto como con uno suave.

Para realizar los cálculos numéricos, se utilizan las **unidades** naturales del sistema:

- Las longitudes se miden en múltiplos de la distancia entre átomos  $a_0$  en la red del grafeno; así que en las ecuaciones presentadas anteriormente se define  $a_0 = 1$ . Recordar que el valor de la distancia entre átomos para el grafeno es  $a_0 = 1.42 \text{ \AA}$  [2, 17].
- La energía es medida en múltiplos del parámetro de acoplamiento entre primeros vecinos  $t$ ; como consecuencia de ello, en las ecuaciones anteriores se define  $t = 1$ . También el potencial electrostático para dopaje está en múltiplos de  $t$ . El valor del parámetro de acoplamiento entre primeros vecinos para el grafeno es  $t = 2.8 \text{ eV}$  [2, 12].
- La corriente se mide en sus unidades naturales  $e/h$  (con  $t = 1$ ).

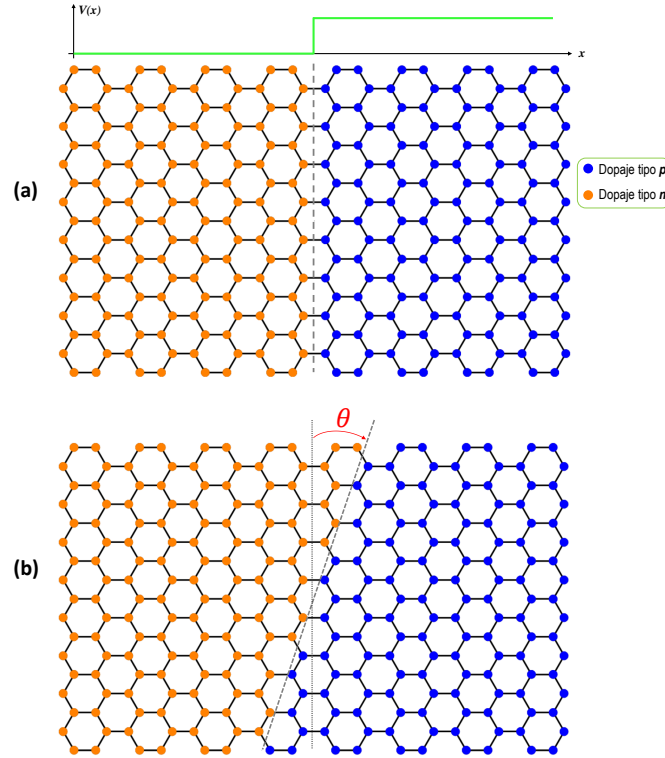
El tamaño de la nanocinta de grafeno está dada por  $L_x \times L_y$ , donde  $L_i$  es la longitud en la dirección correspondiente (dadas en el espacio real); estas longitudes son múltiplos de  $a_0$ .

El dopaje de las nanocintas de grafeno se hace a partir de la asignación de un potencial local en cada sitio de la red; es decir, hay un valor de la energía de sitio  $\varepsilon_i$  por átomo (véase ecuación (3.4)).

Tratando primero una unión  $pn$  con una interfaz abrupta (con potencial abrupto), la nanocinta se divide en dos regiones, como se muestra en la figura 3.8a. Un potencial  $n$  es asignado a los sitios naranjas y uno  $p$  a los sitios azules. La interfaz se indica con una línea discontinua gris. En la parte superior de la figura se esquematiza el perfil del potencial de dopaje asignado en la nanocinta.

Puesto que un objetivo específico de este trabajo es comparar el flujo de corriente con la expresión semiclásica (3.18) para la LSE, se requiere modificar los parámetros que involucran esta expresión. Siendo  $\mu > 0$  la energía de inyección de los electrones a la nanocinta, se fija el potencial  $n = 0$  (véase figura 3.8) para todos los cálculos realizados y que son presentados en el capítulo de resultados; además, en la unión  $pn$  se considera que  $\mu < p$ . Así, a partir de ahora la expresión (3.19) es la que se considera al referirse

a la LSE. Se debe tener en cuenta que  $\mu$ ,  $(p - \mu) \lesssim 0.1$  para asegurar estar dentro de la descripción de Dirac. Recordar que la energía y el potencial son múltiplos de  $t$ .



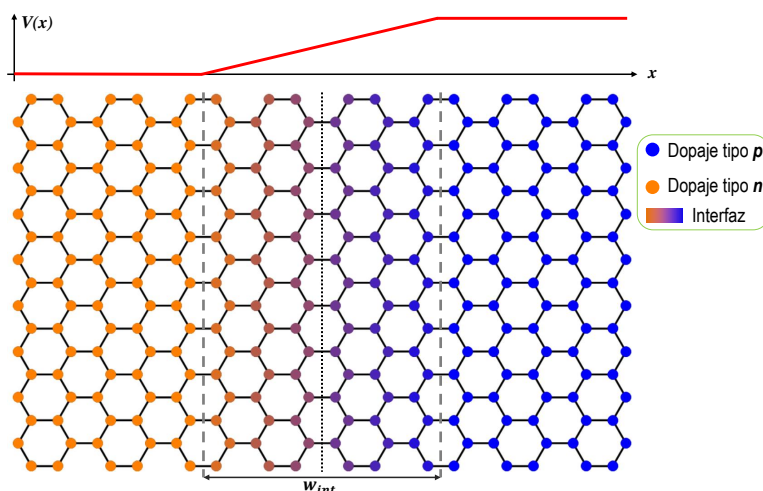
**Figura 3.8:** Dopaje y ángulo de la interfaz para un potencial abrupto. En (a) se muestra el dopaje de la nanocinta de grafeno (con el perfil del potencial aplicado respecto a la dirección  $x$ ), donde la línea discontinua gris representa la interfaz entre la región  $n$  y la región  $p$ . En (b) se muestra el ángulo de la interfaz y la distribución del dopaje producida en la nanocinta.

Otra variable es el ángulo de incidencia  $\theta$  de los electrones en la interfaz. En lugar de modificar el ángulo de inyección en la nanocinta, se modifica el ángulo de la interfaz y se inyectan los electrones en la dirección  $x$ , debido a la equivalencia entre ambos casos (véase apéndice A<sup>9</sup>). En la figura 3.8b se muestra la forma en que se modifica el ángulo de la interfaz, y la distribución del dopaje en los sitios de la red como consecuencia de modificar el ángulo. El sentido que muestra el ángulo  $\theta$  asegura que el ángulo incidente de los electrones sea positivo con respecto a la normal de la interfaz. El vértice del ángulo de la interfaz se ubica en el punto medio<sup>10</sup>  $\mathbf{x}_m = \{x_m, y_m\}$  que se puede

<sup>9</sup>Debido a que se cambia el ángulo de la interfaz, y no el ángulo de inyección, entonces la invariancia del potencial es en la dirección paralela a la interfaz.

<sup>10</sup>El punto medio en la figura 3.8b se localiza en la intersección de la interfaz con la línea punteada negra. Así se sigue la posición del punto medio en todos los casos, aunque se omite dibujar la línea punteada negra.

modificar a conveniencia.



**Figura 3.9:** Dopaje con potencial suave. Se muestra el dopaje de la nanocinta con el potencial suave (véase el perfil en la parte superior), donde la zona de interfaz está delimitada por líneas discontinuas grises; la línea negra punteada marca el mitad de la interfaz, donde el potencial iguala la energía de Fermi. Siguiendo con la convención, el naranja representa el dopaje tipo  $n$  y el azul tipo  $p$ ; en la interfaz, el color varía acorde al valor del potencial que tiene cada sitio.

Siguiendo con una unión  $pn$  suave (potencial suave), en este trabajo se hacen las investigaciones con un dopaje simétrico<sup>11</sup>. Como ya se mencionó, la nanocinta se divide en tres regiones: la región  $n$ , la interfaz (con un ancho  $w_{int}$ ) y la región  $p$ . En la figura 3.9 se muestra una nanocinta con una interfaz suave y dopaje simétrico, donde en la parte superior se esboza el perfil del potencial de dopaje. Al igual que en el caso anterior, los sitios naranjas tienen un potencial de dopaje  $n = 0$  y los sitios azules con un potencial  $p = 2\mu$ ; en la región de la interfaz, los sitios se dibujan de colores degradados entre naranja y azul, en el entendido de que colores cercanos a naranja tienen un potencial más cercano a cero y colores cercanos a azul tienen potencial más cercano a  $2\mu$ . Se marca con una línea punteada negra la parte media de la interfaz, que es donde el potencial de dopaje alcanza el valor de la energía de inyección  $\mu$ .

La variación del ángulo de la interfaz suave se hace de la misma forma que para el potencial abrupto, donde el ángulo  $\theta$  lo hace la línea punteada negra de la figura 3.9 y las líneas que delimitan la interfaz (líneas discontinuas grises) son siempre paralelas a ésta.

<sup>11</sup> Esto tiene como objetivo utilizar el coeficiente de transmisión (3.23), que corresponde a un dopaje suave y simétrico.

### 3.3. Contactos en Nanocintas de grafeno

En las secciones Funciones de Green fuera de equilibrio (NEGF) y Corriente en sistemas abiertos sólo se trató el nanosistema cuando se conecta a dos contactos  $S$  (fuente) y  $D$  (drenaje) para generar el transporte electrónico. En esta sección se hace la descripción para poder calcular el flujo de corriente de una nanocinta de grafeno (nanosistema) conectada a más de dos contactos. También, se introduce el modelo de contactos de banda ancha, que se utiliza para realizar los cálculos numéricos, y se hace una descripción de los detalles de la inyección del haz de electrones a la nanocinta.

#### 3.3.1. Extensión de NEFG a varios contactos

Cuando se tiene un nanosistema conectado a más de dos contactos (el contacto fuente  $S$  y el contacto drenaje  $D$ ), los contactos adicionales pueden ser terminales reales de voltaje o reservorios virtuales que representan interacciones del nanosistema con agentes externos (en el sentido físico de la autoenergía), como se menciona en [12]. Para el estudio en este trabajo del transporte cuántico en nanocintas de grafeno, se ponen contactos en todo el borde de la nanocinta, como se muestra en la figura 3.10; es posible que cada uno de los contactos 1 y 2 se puedan dividir en varios contactos.

Considerando que la nanocinta está conectada a los contactos  $S$ ,  $D$  y  $N$  contactos más (tipo 1 y 2 de la figura 3.10), para cada uno de éstos se tiene un potencial químico  $\mu_i$  y una matriz de acoplamiento  $\tau_i$ , con  $i \in \mathcal{C} := \{S, D, 1, 2, \dots, N\}$ . Siguiendo el desarrollo de la subsección  $\mathbf{G}$  y  $\mathbf{G}^n$  en sistemas cuánticos abiertos, cada contacto excita el nanosistema en equilibrio, de forma que la función de Green del nanosistema abierto es

$$G := (E - H - \bar{\Sigma})^{-1}, \quad (3.24)$$

donde  $\bar{\Sigma} := \sum_{i \in \mathcal{C}} \Sigma_i$ , siendo  $\Sigma_i$  la autoenergía de cada contacto, como lo describe Datta en [13]. De la misma forma, la función de correlación conserva la definición (2.21b), donde ahora la *inscattering function* se define como

$$\Sigma^{in} := \sum_{i \in \mathcal{C}} \Sigma_i^{in} \quad (\text{con } \Sigma_i^{in} := \Gamma_i f_i). \quad (3.25)$$

Por otro lado, el cálculo de la corriente cuando el nanosistema tiene multicontactos, fue resuelto por Büttiker en [30], donde considera que cada contacto puede generar reflexiones espurias. Entonces, para calcular la corriente en el contacto  $i \in \mathcal{C}$  se suman las contribuciones de los contactos restantes, donde dichas contribuciones se describen como lo hace el contacto  $S$  en  $D$  en (2.30). Así, se obtiene la formula de Landauer-

Büttiker<sup>12</sup>

$$I_i(E) = \frac{2e}{h} \sum_{\substack{j \in \mathbb{C} \\ j \neq i}} T_{ij} (f_j - f_i), \quad (3.26)$$

donde  $f_i$  es la función de distribución energética de cada contacto y  $T_{ij}$  es la transmisión del contacto  $j$  al contacto  $i$ , que se define de forma similar a (2.32):

$$T_{ij} := \text{Tr}(\Gamma_i G \Gamma_j G^\dagger). \quad (3.27)$$

Para los contactos  $S$  y  $D$ ,  $f_i$  es la distribución de Fermi, mientras que para el resto de los contactos, la distribución de determina a partir de la condición de que la corriente total en el sistema debe ser cero (considerando la contribución de todos los contactos). Así, al aplicar la formula de Landauer-Büttiker (3.26), se obtiene un sistema de ecuaciones para calcular las funciones de distribución [12, 14]:

$$\sum_{j \in \mathbb{C}_N} \mathcal{T}_{ij} (f_j - f_D) = T_{iS} (f_S - f_D), \quad (3.28)$$

donde  $\mathbb{C}_N := \mathbb{C} \setminus \{S, D\}$  y

$$\mathcal{T}_{ij} \equiv \mathcal{R}_{ij}^{-1} := \begin{cases} -T_{ij} & i \neq j, \\ \sum_{\substack{k \in \mathbb{C} \\ k \neq i}} T_{ik} & i = j. \end{cases} \quad (3.29)$$

Por tanto, la corriente en el drenaje  $D$  por todos los contactos está dada por

$$I_D(E) = \frac{e}{h} \left[ T_{DS} + \sum_{i,j \in \mathbb{C}} T_{Di} \mathcal{R}_{ij} T_{iS} \right] (f_S - f_D). \quad (3.30)$$

### 3.3.2. Contactos de Banda Ancha

Al colocar contactos en las nanocinta de grafeno, como ya se mencionó anteriormente, las autoenergías de éstos describen como perturban al nanosistema. El modelo para los contactos que se utiliza en los cálculos realizados en esta tesis es la *aproximación de banda ancha* (WB, *wide-band*), donde la autoenergía es solamente imaginaria. Esta aproximación asume que la LDOS de todo el contacto no tiene es relevante para la descripción del transporte cuántico [31], sino que sólo toma lugar la LDOS (constante) de la superficie (que está conectada al nanosistema); esta aproximación es razonable cuando se trabaja con voltajes pequeños y energías cercanas a la energía de Fermi [32]. Además, el hecho de que la autoenergía sea imaginaria, tiene el efecto de que los bordes absorban, imitando de alguna forma a nanocintas de grafeno infinitas [21, 32].

---

<sup>12</sup>A partir de la corriente en el contacto  $i \in \mathbb{C}$  que se obtiene en [30], las funciones de transmisión cumple a regla de suma  $\sum_{j \in \mathbb{C}} T_{ji}(E) = \sum_{j \in \mathbb{C}} T_{ij}(E)$ , al considerar que las reflexiones en los contactos se esparcen elásticamente; en equilibrio se cumple que  $T_{ji} = T_{ij}$ .

La autoenergía de banda ancha se escribe como

$$\Sigma_{WB} := -i\nu \sum_{n \in \mathbf{C}} |n\rangle \langle n|, \quad (3.31)$$

donde  $\nu$  es una constante positiva y  $\mathbf{C}$  son los sitios de la nanocinta que están conectados al contacto (como en la figura 3.10).

Otra ventaja por la que es usada la autoenergía de banda ancha (3.31) es que el costo computacional es mucho menor comparado con modelo de cintas semi-infinitas [12, cáp. 3] o cálculos de DFT [33].

### 3.3.3. Contactos de las simulaciones

Además de los dos contactos necesarios  $S$  (contacto fuente, donde se inyectan los electrones) y  $D$  (contacto drenaje, donde se recolectan los electrones inyectados) colocados en extremos opuestos de la nanocinta de grafeno, se usan adicionalmente dos contactos más, llamados “contacto 1” y “contacto 2”. Estos dos contactos extra tienen el objetivo de absorber la corriente que llega a los bordes superior e inferior de la nanocinta, pues al estar modelados como contactos de banda ancha imitan a un sistema infinito [21, 32]. En la figura 3.10 se muestra la posición de los cuatro contactos básicos utilizados en los cálculos de la corriente. A menos que en el texto se mencione un cambio de contactos, cuando se hagan referencia a los contactos  $S$ ,  $D$ , 1 y 2, se considerarán los contactos de esta figura.

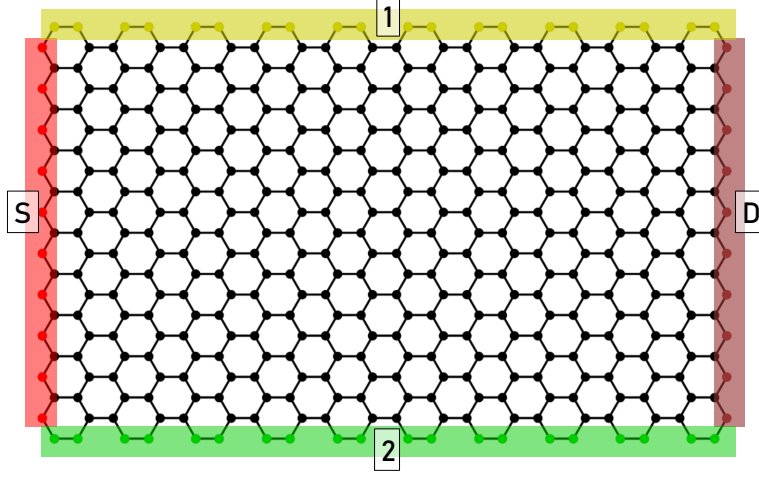
Puesto que el contacto  $S$  se localiza en el borde izquierdo (figuras 3.8 y 3.9, respectivamente), entonces siempre se inyectan electrones en la región  $n$  y se inciden hacia la interfaz de la unión  $pn$ . Además, se asume que la inyección de los electrones no modifica el Hamiltoniano efectivo del sistema, como lo hacen Stegmann y Szpak en [21, 34], por lo que la autoenergía del contacto  $S$  se toma como  $\Sigma_S = 0$ ; las autoenergías de los tres contactos restantes (y los adicionales que se puedan definir) se modelan mediante la aproximación de banda ancha (3.31) con  $\nu = t = 1$ .

### 3.3.4. Contacto de inyección

Como ya se mencionó en la sección anterior, los electrones son inyectados por el borde izquierdo de la nanocinta (donde se coloca el contacto  $S$ ). Si  $\mu > 0$  es la energía de inyección de los electrones, entonces esta energía define el nivel de Fermi y la longitud de onda de Fermi asociada está dada por<sup>13</sup>

$$\lambda_F = \frac{3\pi}{\mu}. \quad (3.32)$$

<sup>13</sup>Esta expresión se obtiene considerando que  $\lambda_F = \frac{2\pi}{|q|}$  y usando (3.9) para la energía.



**Figura 3.10:** Contactos utilizados para los cálculos numéricos del flujo de corriente y la comparación con la LSE. Se etiqueta el nombre de cada contacto, donde  $S$  es el contacto por donde se inyectan los electrones. Los sitios de la red que se conectan a cada contacto se remarcan con el color del contacto, y éstos sitios son los que se contienen en la matriz de acoplamiento  $\tau_i$  de cada contacto.

Los electrones inyectados en  $S$  hacia la interfaz de la unión se asumen como ondas planas con un momento  $\mathbf{q} = (q_x, 0) = (\mu/\hbar v_F, 0)$ ; por ello, la *inscattering function* asociada a este contacto  $S$  se modela como [21, 34]

$$\Sigma_S^{in} = \sum_{n,m \in S} g(\mathbf{r}_n) g(\mathbf{r}_m) \psi_n^{D*}(\mathbf{q}) \psi_m^D(\mathbf{q}) |n\rangle \langle m|, \quad (3.33)$$

que corre en todos los sitios del contacto  $S$ , y donde  $\psi_n(\mathbf{q})$  son los eigenestados del Hamiltoniano (3.14) y  $g(\mathbf{r})$  el perfil de inyección. Considerando los eigenestados (3.13) resultantes y que  $S$  está en la región  $n$ , se tiene que

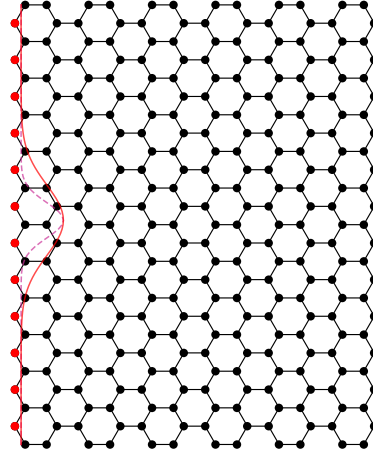
$$\psi_n^D(\mathbf{q}) = \begin{cases} c_{K'} e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{K}') \cdot \mathbf{r}_n} + c_K e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{K}) \cdot \mathbf{r}_n} & n \in A, \\ c_{K'} e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{K}') \cdot \mathbf{r}_n + i\theta_q} - c_K e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{K}) \cdot \mathbf{r}_n - i\theta_q} & n \in B, \end{cases} \quad (3.34)$$

donde  $\theta_q = \arg(iq_x + q_y)$  es la fase entre las subredes, y  $c_{K/K'}$  es la amplitud de excitación alrededor del valle  $\mathbf{K}/\mathbf{K}'$ . Nótese de la figura 3.11 (al igual que en la figura 3.10) que todos los sitios del contacto  $S$  pertenecen a la subred  $B$ , por lo que sólo se considera la segunda línea de (3.34). Para los cálculos presentados en el próximo capítulo, se inyecta por igual en ambos valles, por lo que se tiene que  $c_K = c_{K'} = 0.5$ .

La inyección de electrones se hace mediante un haz con ancho finito, que tiene un perfil gaussiano con el fin de comparar con óptica geométrica, como se muestra en la figura 3.11 con la curva roja; este perfil gaussiano está descrito por la función [34]

$$g(\mathbf{r}) = e^{-4 \ln(2) \frac{(y-L_y/2)^2}{d_{opt}^2}}, \quad (3.35)$$

donde  $d_{opt}$  es un parámetro que controla el ancho gaussiano para que el haz tenga la mínima difracción al llegar al borde contrario; este parámetro está dado por  $d_{opt}^2 = \frac{2\pi\hbar v_F}{\mu} L_x$ . Por lo anterior, si se quiere tener un haz de electrones con el ancho a la mitad de la curva roja (curva discontinua morada de la figura 3.11), se hace el cambio  $d_{opt}^2 \rightarrow 0.5d_{opt}^2$  en (3.35).



**Figura 3.11:** Inyección en la nanocinta. Los sitios rojos son los pertenecientes al contacto  $S$ . La curva continua roja representa el perfil de distribución en que se inyectan electrones por el borde; la curva discontinua morada representa el perfil de inyección con la mitad del ancho de la curva roja.

La componente  $y_m$  del punto medio  $\mathbf{x}_m$  mencionado en la subsección 3.2.4, se localiza en el centro de distribución del perfil gaussiano. Esto ayuda a representar la LSE con rayos.





---

## Capítulo 4

# Resultados numéricos y análisis

---

Este capítulo está dedicado a la exhibición y análisis de los resultados obtenidos para las simulaciones del transporte cuántico en uniones  $pn$ . El tamaño de las nanocintas se presentan en múltiplos de  $a_0$  y la intensidad de corriente está normalizada al valor más alto que se encuentra en cada simulación (véase la escala de la figura 4.1). En la figura 4.1 se muestra la referencia de la representación de los resultados; en la parte superior de cada figura se muestran las condiciones de dopaje (potencial  $p$ ) y de inyección (energía y ángulo de inyección), así como el ángulo resultante de la LSE. Se hace la comparación del flujo de corriente con las trayectorias semiclásicas que siguen las leyes de la óptica, como la LSE y la ley de reflexión. También se muestran los efectos que tiene el hecho que los electrones tenga naturaleza ondulatoria y se inyecten con un haz de ancho finito. Por último, se tratan las uniones  $pn$  con potencial suave.

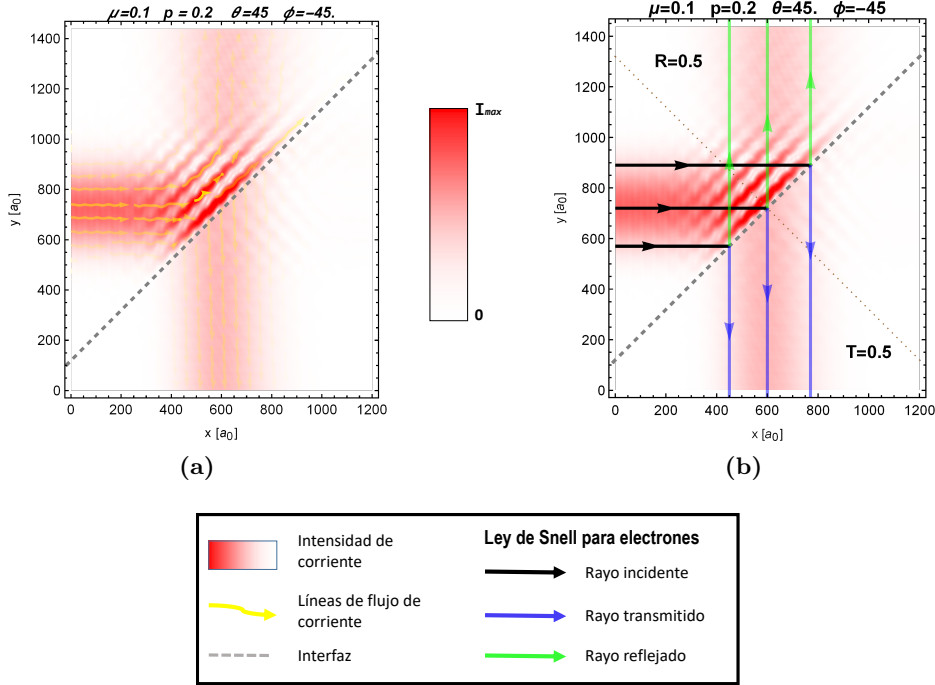
La corriente que se muestra en todas las figuras de este capítulo está en el límite de un sistema estacionario, donde el flujo de corriente ya no se cambia con el tiempo. La corriente a través de la heterounión de grafeno se expresa en términos de la probabilidad en que un electrón se transmita a través de ella [13].

### 4.1. Corriente y ley de Snell de electrones (LSE)

A continuación, se presentan una serie de resultados donde se muestran que los electrones siguen la LSE en la interfaz de la unión  $pn$ , variando el ángulo de la interfaz (equivalente al ángulo de inyección de los electrones) y el potencial de la región tipo  $p$ . El haz de electrones incidente es inyectado desde el contacto  $S$  hacia la interfaz, por lo que en todos los casos está en la región  $n$ .

Las condiciones necesarias para definir antes del cálculo de la corriente por el método de NEGF son: tamaño, valor y perfil del potencial de dopaje, contactos utilizados (con autoenergía de banda ancha) y condición de inyección (*in-scattering function* de  $S$ ). Tomando en cuenta el Hamiltoniano (3.4), se pueden calcular la función de Green

#### 4. RESULTADOS NUMÉRICOS Y ANÁLISIS

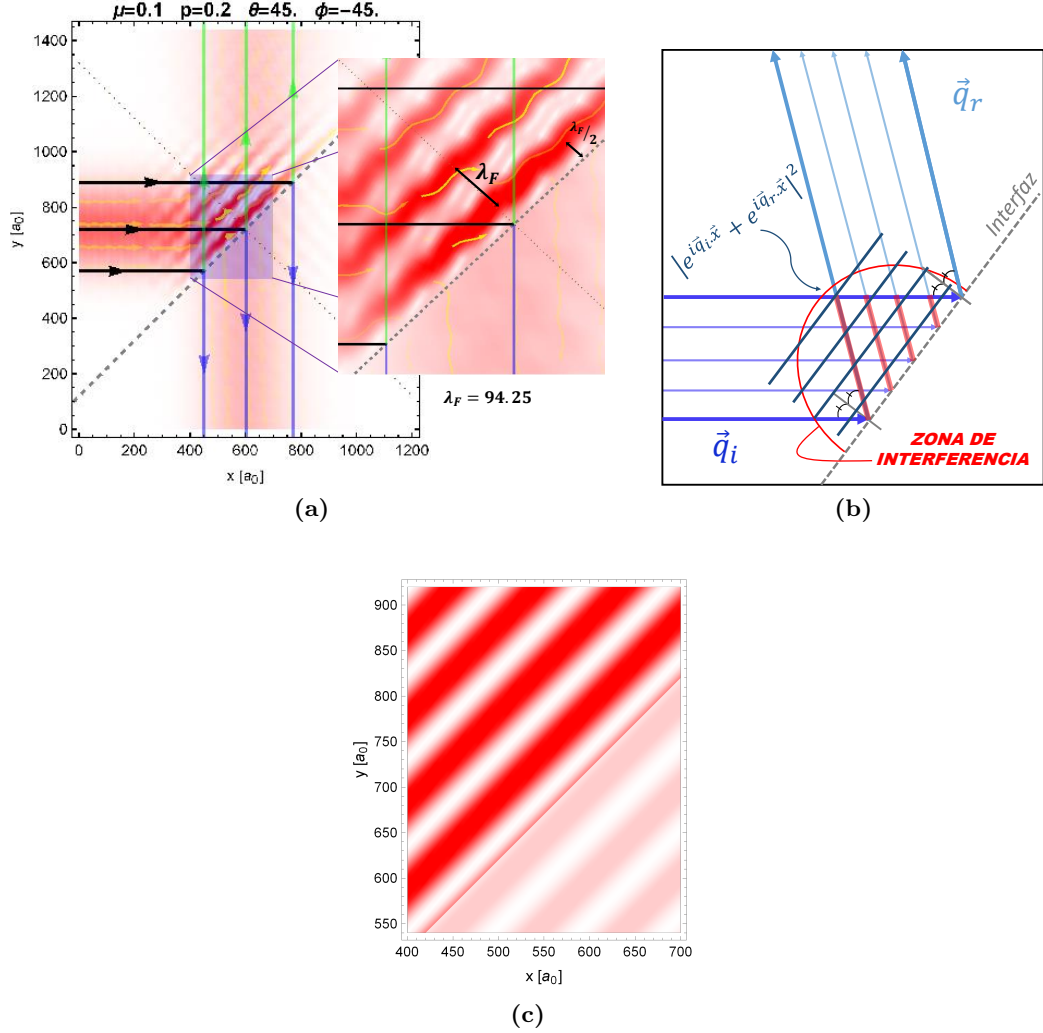


**Figura 4.1:** Corriente en las nanocintas de grafeno; se hace la comparación entre el flujo de corriente y la ley de Snell de electrones (LSE). La intensidad de la corriente se muestra en la barra del centro y las condiciones de inyección y dopaje se muestran en la parte superior. La intensidad de las líneas de flujo está relacionada con la intensidad de la corriente. En (a) se muestra un divisor de haz. En (b) cada triada de rayos (incidente, transmitido y reflejado) sigue la LSE y se marca la normal a la interfaz con una línea punteada. R y T son los coeficientes de reflexión y transmisión, respectivamente, con expresiones semiclásicas.

y la función de Correlación (considerando todos los contactos), y con ello el flujo de corriente en la nanocinta con la ecuación (3.30).

La LSE se representa mediante tres flechas, donde la flecha negra representa la inyección (electrones incidentes), y al llegar a la interfaz de la unión, hay una flecha verde para electrones reflejados (con ángulo  $\theta_r = -\theta$ ) y una azul para los transmitidos (con ángulo  $\phi$  calculado a partir de la LSE (3.19)); véase figura 4.1. Esta representación de la LSE se hace con un Rayo Central, que va por el centro del haz de electrones, y sigue la mayor intensidad de corriente del haz. Los rayos reflejado y transmitido comienzan en el punto medio  $\mathbf{x}_m$  que se menciona en la subsección Simulación de uniones  $pn$ , donde también llega el rayo incidente.

Para el estudio de los electrones reflejados y transmitidos, se comienza incidiendo el haz de electrones a  $\theta = 45^\circ$ . De esta manera es posible obtener un *divisor de haz 50/50* que corresponde al esquema de flujo de corriente de la figura 4.1, donde se observa un



**Figura 4.2:** Patrón de interferencia paralelo a la interfaz. En (a) se muestra que el patrón de interferencia tiene la longitud de onda de Fermi  $\lambda_F$  calculada de (3.32). En (b) se muestra el modelo para explicar el patrón de interferencia obtenido en los resultados numéricos de la corriente; en ángulo marcado corresponde a  $\theta$ . La interferencia por el haz de ancho finito se resalta con líneas rojas. En (c) se grafica la intensidad  $A_{int}$  (de la interferencia) para  $\theta = 45^\circ$ , correspondiente a la región del acercamiento en (a).

fenómeno importante que es obtenido desde el cálculo numérico de la corriente: un patrón ondulatorio con frente de onda paralelo a la interfaz de la unión. Además, se muestra que el flujo de corriente coincide con la imagen semiclassical dada por la LSE. En esta simulación, se inyectan electrones con un perfil gaussiano y una energía  $\mu = 0.1$ , que corresponden a una longitud de onda de Fermi  $\lambda_{F,0.1} = 94.25$ . En la figura 4.2a se muestra un acercamiento a la región del patrón ondulatorio, y se observa que éste posee una longitud de onda  $\lambda_{F,0.1}$ , es decir, la longitud de onda de Fermi correspondiente a

## 4. RESULTADOS NUMÉRICOS Y ANÁLISIS

---

la energía de inyección de los electrones. Este efecto se debe a la interferencia del haz incidente de electrones con el haz reflejado de electrones. En la figura 4.2b se presenta el modelo que explica el patrón ondulatorio. Al considerar que los electrones incidentes tienen un vector de onda  $\mathbf{q}_i$  y los reflejados  $\mathbf{q}_r$ , como los haces tienen un ancho finito, algunos electrones incidentes interfieren con otros electrones reflejados (resaltados con líneas rojas en la figura), generando un patrón de interferencia con una amplitud que corresponde a

$$A_{int} = |e^{i\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{x}} + e^{i\mathbf{q}_r \cdot \mathbf{x}}|^2. \quad (4.1)$$

Dada la forma en la que se consideran los parámetros de inyección de electrones, donde  $\theta$  es el ángulo de la interfaz,  $\mathbf{q}_i = 2\pi/\lambda_F(1, 0)$  y  $\mathbf{q}_r = 2\pi/\lambda_F(-\cos(2\theta), \sin(2\theta))$ . La interferencia obtenida es un fenómeno cuántico, que no se considera en la óptica electrónica de la LSE, donde se consideran rayos de electrones (haciendo la analogía con la óptica geométrica).

Considerando la región que concierne al acercamiento de la figura 4.2a, el modelo propuesto se evidencia al graficar la amplitud (4.1) para  $\theta = 45^\circ$  en la figura 4.2c. En la intensidad calculada analíticamente, se ve desvanecida la región  $p$ . Se observa que la intensidad en ambas figuras concuerdan cualitativamente.

Lo crucial en las heterouniones de grafeno es la energía que poseen los electrones para cada región ( $\mu$  en la región tipo  $n$  y  $p - \mu$  en la región  $p$ ). Para mostrar el efecto de las heterouniones en grafeno, los electrones son inyectados en una nanocinta sin dopaje. Este flujo de corriente es mostrado en la figura 4.3a. Se observa que el haz inyectado sufre difracción a lo largo de la nanocinta, debido a que los electrones se comportan como ondas. El ancho del haz inyectado tiene consecuencias directas en la difracción, ya que entre más angosto sea dicho haz, más difracción presenta. En la figura 4.3b se muestra el flujo de corriente en la nanocinta, donde el ancho del haz inyectado tiene la mitad del caso anterior<sup>1</sup>, obteniéndose mayor difracción. Ahora, al hacer una unión  $pn$  en la misma nanocinta, con un dopaje simétrico<sup>2</sup> (pues la energía de los electrones inyectados es  $\mu = 0.1$ , y el potencial de la región  $p$  es  $p = 0.2$  y  $n = 0$ ), como se muestra en la figura 4.3c, se observa que el haz transmitido se reenfoca<sup>3</sup> debido a la refracción negativa de los electrones. Este reenfoque del haz transmitido de una región a otra, se puede aprovechar para disminuir la difracción del haz inyectado en la nanocinta de grafeno, haciendo una secuencia de heterouniones  $pn$ . Con una heterounión  $pnpn$ , se puede obtener una *supercolimación*<sup>4</sup> del haz inyectado, pues al pasar de la región  $n$  hacia la  $p$ , el haz divergente se vuelve convergente, y sucede lo contrario cuando el haz va de la región  $p$  a la  $n$ . La supercolimación mejora al hacer una secuencia periódica de una

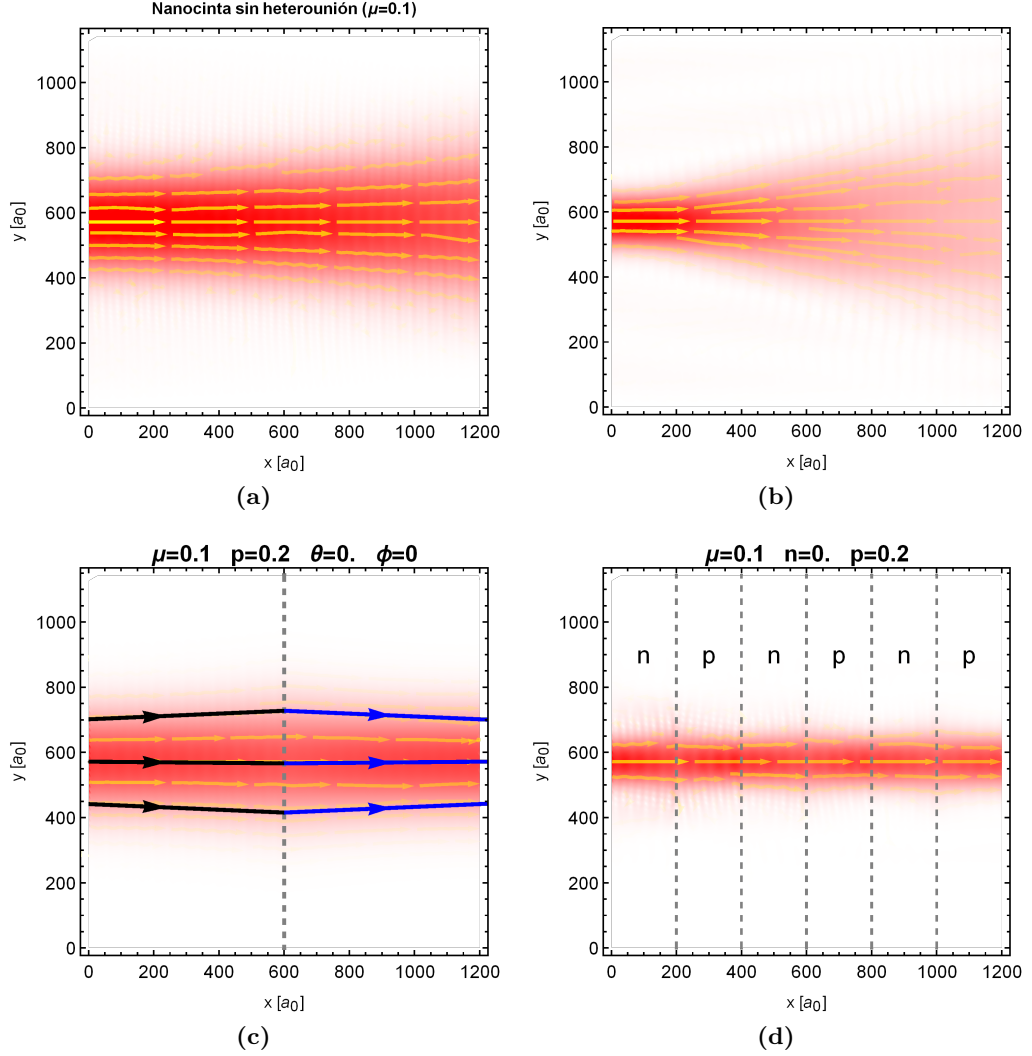
---

<sup>1</sup>La diferencia en el ancho del haz para ambos casos se puede entender de mejor manera al ver los perfiles de la figura 3.11.

<sup>2</sup>Los electrones en la región  $n$  están en la banda de conducción, y en la región  $p$  están en la banda de valencia.

<sup>3</sup>Refiriendo a que de ser un haz divergente pasa a ser convergente.

<sup>4</sup>En [35] se define la “supercolimación” como la propagación anisotrópica de la luz sin difracción.



**Figura 4.3:** Flujo de corriente en la nanocinta de grafeno con  $\mu = 0.1$ . En (a) se presenta sin dopaje, en (b) también sin dopaje pero con el haz inyectado de la mitad del ancho de (a), en (c) una unión  $pn$  con dopaje simétrico, y en (d) es mostrada una heterounión  $pnpn$ . En (a) y (b) es evidente la difracción del haz inyectado. En (c) la incidencia es normal a la interfaz de la unión  $pn$ , con dopaje simétrico. Tres rayos incidentes envuelven al haz de electrones inyectado, por lo que los rayos transmitidos correspondientes también cubren al haz transmitido. Nótese que para la incidencia normal se genera un dispositivo de enfoque con transmisión es total ( $T = 1$ ), del contacto  $S$  al  $D$  (bordes opuestos). La heterounión en (d) se hace con el haz inyectado de la mitad del ancho de (a), y se observa que la difracción del haz a través de toda la nanocinta es casi nula (logrando la colimación de haz de electrones).

unión  $pn$  con el mismo ancho para ambas regiones ( $n$  y  $p$ ), como lo muestran Park *et. al* en [35] usando un Hamiltoniano de Dirac. Usando el haz de ancho  $1/2$  (figura 4.3b)

#### 4. RESULTADOS NUMÉRICOS Y ANÁLISIS

---

que presenta mayor difracción, se hace la heterounión  $pnpn$  periódica y simétrica. Se presenta en la figura 4.3d, y se observa que el haz inyectado sufre supercolimación (compárese la corriente en las figuras 4.3b y 4.3d). Importante remarcar que en la figura 4.3d usa la descripción de amarre fuerte (3.4).

Dado que en la óptica geométrica no existe la difracción, con el fin de comparar el flujo de corriente con los rayos dados por la LSE, se simula este fenómeno utilizando rayos distintos al central, llamados “rayos laterales”, que envuelven<sup>5</sup> al haz incidente; estos rayos laterales tienen una inclinación ligeramente distinta al rayo central. De este modo, de ahora en adelante, el ángulo  $\theta$  (y su correspondiente  $\phi$ ) se refiere al ángulo de incidencia del rayo central. Por ello, en la figura 4.3c se muestran tres rayos incidentes que envuelven al haz incidente, y de igual forma los rayos transmitidos envuelven al haz transmitido. Las líneas de flujo de corriente muestran que todos los electrones en el ancho del haz incidente siguen la LSE al pasar de una región a otra; además, para este caso de incidencia normal ( $\theta = 0^\circ$ ), la transmisión del haz de electrones del contacto  $S$  a  $D$  (véase figura 3.10) es total.

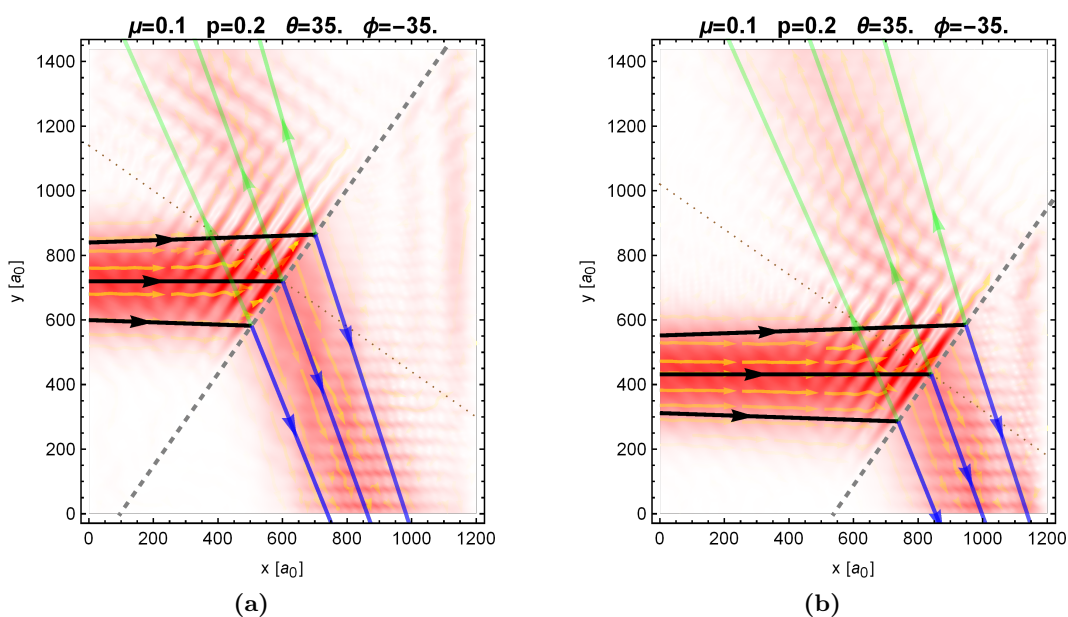
Con el acuerdo de la simulación de la difracción del haz incidente con rayos, en la figura 4.4 se presenta el esquema de la corriente correspondiente al ángulo de incidencia  $\theta = 35^\circ$ , inyectando nuevamente los electrones con una energía  $\mu = 0.1$ , donde el haz incidente se cubre por dos rayos laterales y el central, al igual que en los casos anteriores. En la figura 4.4a se observa de mejor manera que el haz transmitido está envuelto por los rayos transmitidos correspondientes a los rayos laterales, mientras que en la figura 4.4b se observa que los rayos reflejados envuelven al haz de electrones reflejado. Además, los rayos laterales muestran que en la región  $n$  el haz diverge y en la región  $p$  el haz (ahora transmitido) converge. La divergencia del haz reflejado es producto de la divergencia del haz incidente al llegar a la interfaz. La intensidad de los rayos transmitidos y reflejados están directamente relacionados con los coeficientes de reflexión y transmisión semiclásicos (3.22), de modo que cuando el coeficiente es alto la intensidad del rayo también lo es, y viceversa. Este efecto de la intensidad de los rayos se puede apreciar mejor en las figuras 4.5 y 4.6, aunque también se observa en la figura 4.4.

En esta tesis se hace el estudio de sistemas finitos, como se menciona en la subsección Contactos de las simulaciones, por lo que en los bordes de la nanocinta de grafeno se colocan contactos con autoenergía compleja  $-i\nu$  ( $\nu = 1$ ) para suprimir reflexiones de la corriente, pero éstos no suprimen completamente dichas reflexiones por no ser contactos perfectos. Puesto que los bordes reflejan una corriente pequeña, ésta interfiere con la corriente del haz reflejado y/o transmitido (y en algunos casos con el haz incidente), de tal forma que se observan patrones ondulatorios en estos haces, como son evidenciados en la figura 4.4. Entre más cercanos se encuentren los bordes del haz inyectado y de la zona donde incide en la interfaz, mayor es la interacción con la corriente reflejada por

---

<sup>5</sup>Para los fines de este trabajo, se habla de que el haz de electrones se envuelve por rayos laterales, cuando éstos delimitan una región con la intensidad significativa del haz.

los bordes. Por ello, para evitar la interferencia con los bordes los cálculos numéricos se hacen lo más lejos posible de los bordes y la dimensión del sistema en dirección  $y$  es mayor que en la dirección  $x$  (véase apéndice B). Este efecto por los bordes se puede explicar de forma similar al patrón de interferencia que se produce paralelo a la interfaz de la unión  $pn$ . Así, el cambio de la posición de inyección en la figura 4.4 tiene el propósito de mostrar de mejor manera la LSE con el flujo de corriente, ya que en la figura 4.4a el haz reflejado sufre interferencia con la corriente reflejada por el contacto 1.



**Figura 4.4:** Los haces de electrones transmitido y reflejado son delimitados por los respectivos rayos que siguen la LSE, al envolver el haz incidente con rayos incidentes. Se observa de mejor manera en (a) el caso del haz transmitido y en (b) el del haz reflejado.

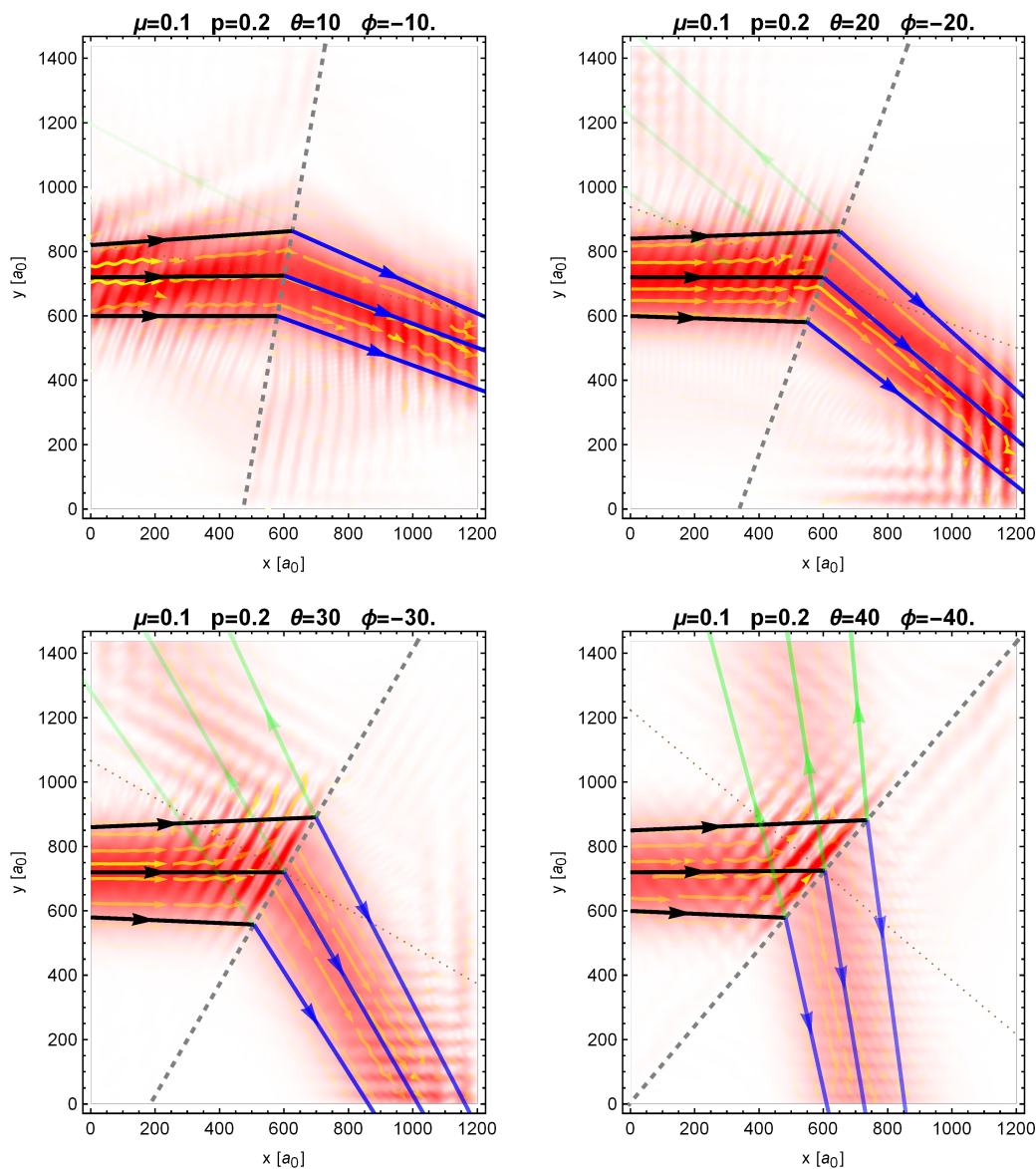
Para seguir sustentando la validez de la LSE con los resultados numéricos obtenidos, se cambian parámetros que están implicados en (3.19): ángulo de incidencia y potencial de dopaje  $p$ . En las figuras 4.5 y 4.6 se obtiene que la corriente calculada concuerda con la LSE para diversas situaciones. La coincidencia de la LSE con la corriente se espera en el régimen

$$a \ll \lambda_F \ll L, \quad (4.2)$$

donde  $L$  es la dimensión del sistema. Esta condición indica que los electrones puedan ser afectados por el cambio en las regiones de dopaje, ya que la longitud de onda  $\lambda_F$  (véase ecuación (3.32)) estima la resolución del electrón en la nanocinta.

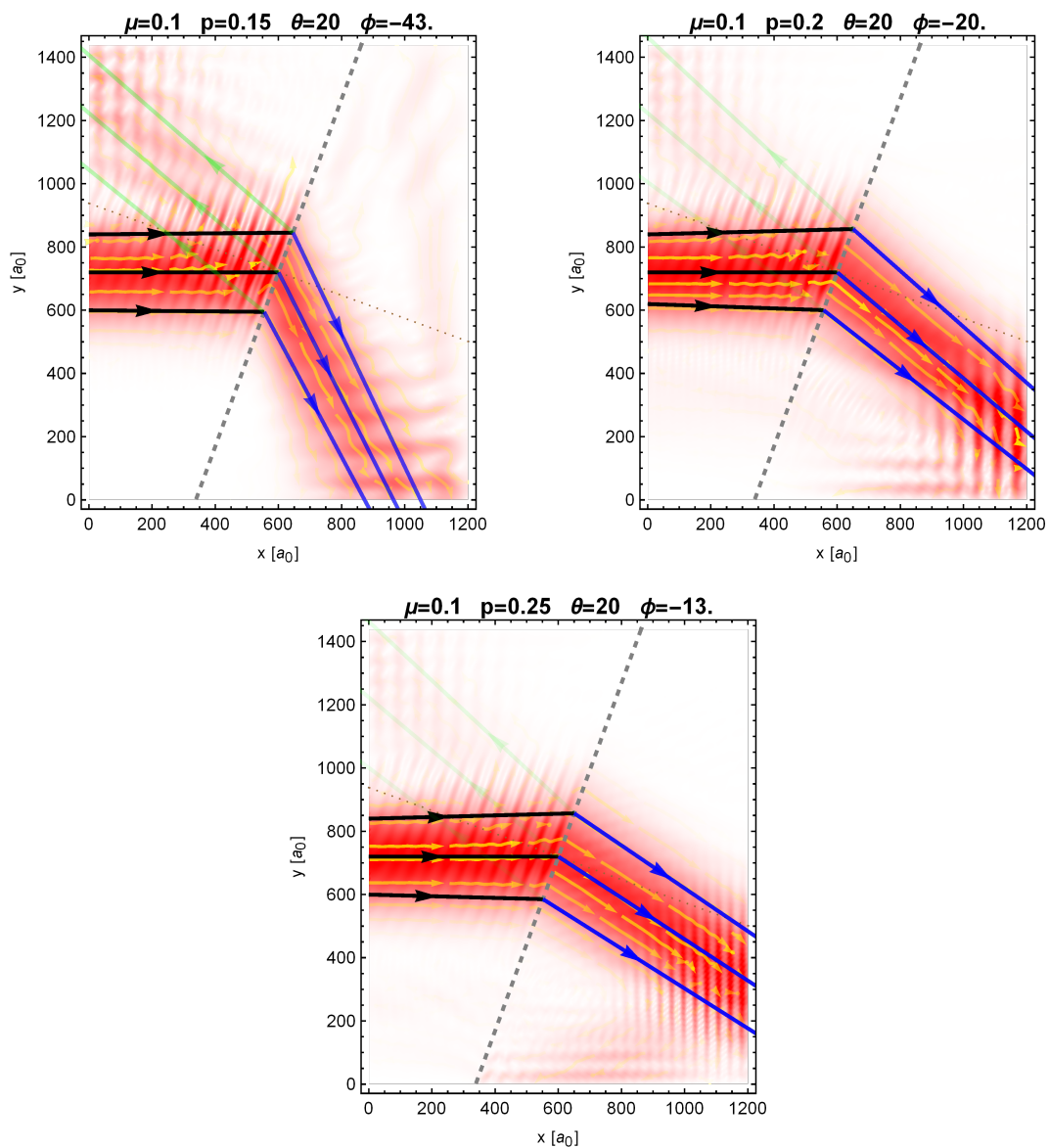


#### 4. RESULTADOS NUMÉRICOS Y ANÁLISIS



**Figura 4.5:** Corriente en la unión  $pn$  para distintos ángulos de incidencia, manteniendo los potenciales de dopaje constantes. Se observa que a mayor ángulo de incidencia mayor ángulo de transmisión se obtiene, siguiendo la LSE. De esta forma, para todos los casos los rayos reflejados y transmitidos envuelven los respectivos haces de electrones. Se observa que para ángulos pequeños (figura superior izquierda) surgen corrientes espurias que van hacia el contacto del borde superior.

En la figura 4.5, se mantiene fijo el dopaje en la región  $p$  ( $p = 0.2$ ) y se varía el ángulo de la interfaz. Para los cuatro ángulos distintos ( $10^\circ$ ,  $20^\circ$ ,  $30^\circ$  y  $40^\circ$ ) los rayos transmitidos y reflejados envuelven a los haces correspondientes, hasta donde se per-



**Figura 4.6:** Inyección del haz de electrones al mismo ángulo  $\theta = 20^\circ$ , variando el potencial electrostático en la región  $p$ . Corriente para el caso donde el potencial que sienten los electrones en la región  $p$  es menor al de la región  $n$  ( $p = 0.15$ ), para un potencial simétrico ( $p = 0.2$ ), y otro caso asimétrico ( $p = 0.25$ ). El ángulo del haz transmitido respeta ser inverso al valor de  $p$ , como en la expresión para la LSE.

mite mostrar debido a la interferencia con los contactos 1 y 2. De la misma forma, se observa que el haz incidente diverge y el transmitido converge. En la figura 4.6, el ángulo de incidencia se conserva fijo ( $\theta = 20^\circ$ ) pero se varía el potencial de dopaje  $p$ . Se reconoce para cada uno de los tres casos presentados que los rayos transmitidos

envuelven al haz transmitido (el haz reflejado presenta interferencia significativa con el contacto 1). El caso de  $p = 0.25$  entra en la descripción de Dirac, pues como se observa en la figura 3.4b, con una diferencia de 0.15 con la energía de Fermi todavía la relación de dispersión lineal es similar a la relación de dispersión del grafeno (ecuación (3.8)) y es válida la aproximación de electrones de Dirac.

La concordancia de la corriente con la LSE sigue cumpliéndose para sistemas con diferente tamaño al presentado en esta sección, siempre que se cumpla la condición (4.2). Véase el apéndice B.

Con los resultados presentados en esta sección, se muestra que cuando los electrones cambian de una región de dopaje a otra en una nanocinta de grafeno, siguen la LSE en la interfaz. En este estudio, se considera la difracción del haz incidente, de modo que no todos los electrones tienen el mismo ángulo de incidencia; además, se genera una interferencia entre los haces incidente y reflejado. Se tiene cuidado de observar la interferencia de los electrones reflejados por los contactos de los bordes de la nanocinta con los electrones en los haces reflejados y transmitidos.

### 4.2. Efectos del ancho finito del haz de electrones inyectado

Esta tesis se estudia la inyección de un haz de ancho finito de electrones, y esto tienen consecuencias importantes en el transporte cuántico de nanocintas de grafeno y serán tratados en esta sección. Además de la interferencia entre los haces incidente y reflejado presentada en la sección anterior, también se mostrarán los coeficientes de transmisión y reflexión de las expresiones semiclásicas y los calculados con NEGF, así como transmisión más allá el ángulo crítico.

#### 4.2.1. Coeficientes de Transmisión y Reflexión

Cuando se estudia una nanocinta de grafeno finita, se colocan contactos en los bordes de ésta<sup>6</sup>, de tal forma que se pueden calcular (numéricamente) los coeficientes de transmisión y reflexión por el método de NEGF. Estos valores se comparan con los coeficientes de transmisión y reflexión semiclásicos (3.22), para el caso de una interfaz abrupta<sup>7</sup>.

---

<sup>6</sup>Los contactos se pueden definir con cierta libertad en los bordes de la nanocinta, no solamente como se plantea en la sección Contactos de las simulaciones.

<sup>7</sup>Los coeficientes semiclásicos se notan como  $T$  y  $R$ , mientras que los calculados con NEGF se notan como  $T_G$  y  $R_G$ .

Sean  $T_G$  y  $R_G$  los coeficientes de transmisión y reflexión calculados a partir de NEGF, respectivamente. Para el cálculo de estos coeficientes, es necesario considerar todos los contactos definidos en los bordes de la nanocinta (véase, por ejemplo, la figura 3.10 con cuatro contactos). Recordando que  $T_{jS}$  es la transmisión (3.27) del contacto  $S$  al  $j$  ( $j \in \mathbb{C} \setminus \{S\} := \bar{\mathbb{C}}$ ), para calcular  $T_G$  y  $R_G$  se hace el cálculo numérico

$$T_G = \frac{\sum_{i \in \mathbb{C}_T} T_{iS}}{\sum_{i \in \bar{\mathbb{C}}} T_{iS}}, \quad R_G = \frac{\sum_{I \in \mathbb{C}_R} T_{iS}}{\sum_{i \in \bar{\mathbb{C}}} T_{iS}}, \quad (4.3)$$

donde  $\mathbb{C}_T$  y  $\mathbb{C}_R$  son los contactos utilizados para medir la transmisión y reflexión, respectivamente;  $\bar{\mathbb{C}}$  son todos los contactos conectados en los bordes de la nanocinta.

Para tener un valor confiable y preciso de  $T_G$  y  $R_G$ , primero se hace el cálculo de la corriente con los contactos que se mencionan en la sección Contactos de las simulaciones, para determinar a que zona de los bordes llegan los haces reflejado y transmitido, después se definen los contactos necesarios para cubrir esas zonas y se vuelve a calcular la corriente.

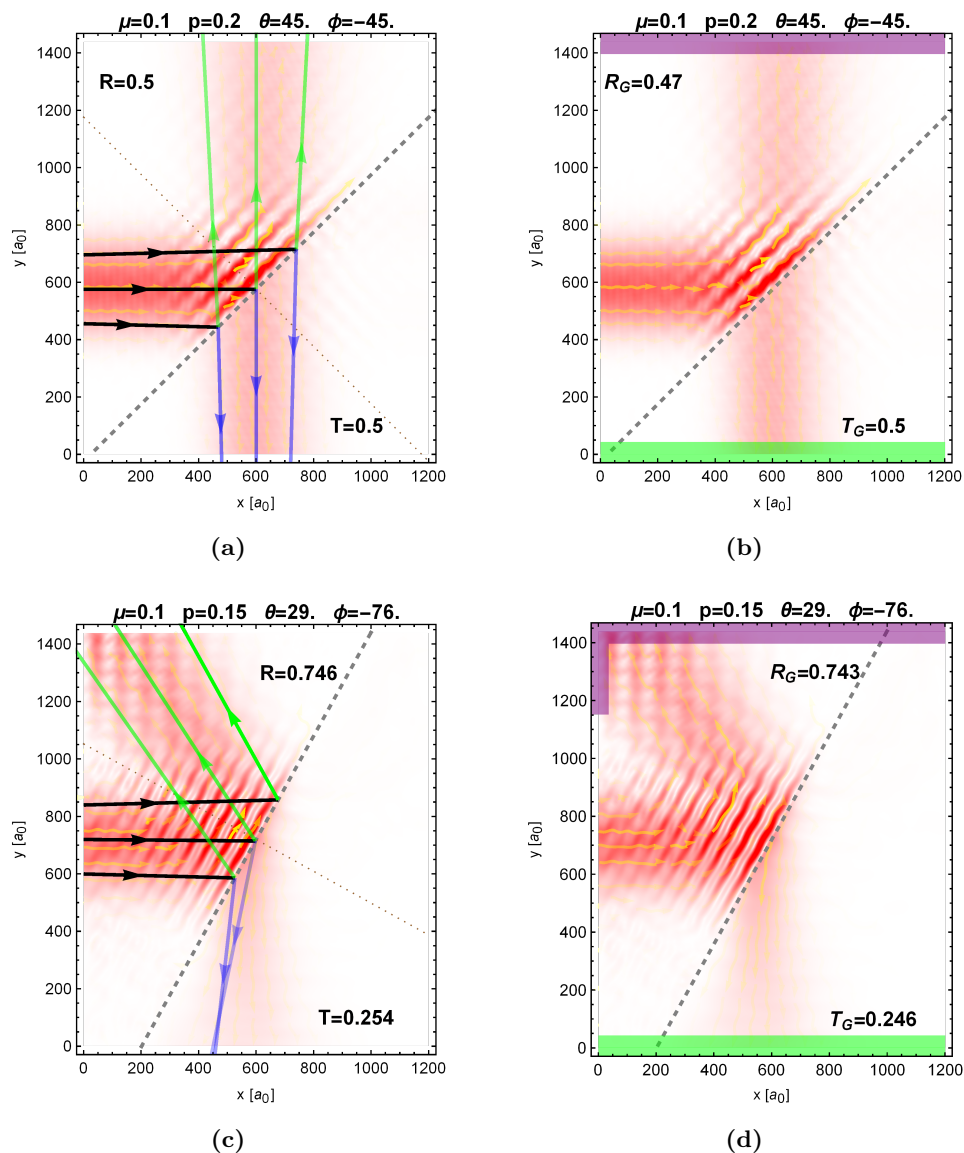
En la figura 4.7 se muestran dos ejemplos de los coeficientes calculados de forma semiclásica y con NEGF. Para el primer caso, que corresponde al divisor de haz 50/50<sup>8</sup> con  $p = 0.2$  e inyección  $\mu = 0.1$  y  $\theta = 45^\circ$  (figura 4.7a), el coeficiente  $R_G$  coincide de forma aproximada pero no precisa con el valor de  $R$ , y usándose el contacto violeta (contacto 1) de la figura 4.7b se obtiene que  $R_G < R$ . Esto es debido a la consideración de que el sistema es finito, donde surgen transmisiones espurias, y la transmisión de electrones entre los contactos  $S$  y  $D$  es no nula (transmisión  $T_{DS} = 0.03$ ), de tal forma que se cumple  $T_G + R_G + T_{DS} = 1$ .

El divisor de haz es un caso donde se puede encontrar de forma sencilla de donde surge la discrepancia entre  $R_G$  y  $R$ . Para una unión  $pn$  asimétrica con  $p = 0.15$  e inyección  $\mu = 0.1$  y  $\theta = 29^\circ$  (flujo de corriente en figura 4.7c), se tiene que  $T = 0.254$  y  $R = 0.746$ . Usando los contactos 1 y 2 regulares, el cálculo de las transmisiones resulta ser  $T_{1S} = 0.726$ ,  $T_{2S} = 0.250$  y  $T_{DS} = 0.024$  (valores normalizados). De un análisis previo de la figura 4.7c, donde se estimó la región donde llega el haz reflejado, se hace una nueva definición del contacto 1 para calcular de mejor manera la transmisión del rayo reflejado, resultando el contacto violeta de la figura 4.7d. Ahora el coeficiente  $R_G = 0.47$  es más similar al coeficientes  $R$ , y la transmisión  $T_{DS} = 0.010$  hace parte de la corriente transmitida, por lo que el valor  $T_G + T_{DS} = 0.256$  es más similar al coeficiente  $T$ . Esta es la manera de redefinir los contactos para obtener un mejor cálculo de los coeficientes de reflexión y transmisión. De igual forma, se pueden definir más de cuatro contactos, con el fin de mejorar el cálculo numérico de  $T_G$  y  $R_G$ , como es mostrado en la figura (4.9a) de la siguiente subsección.

---

<sup>8</sup>Llamado así justamente por los valores de  $T$  y  $R$  igual a 0.5.

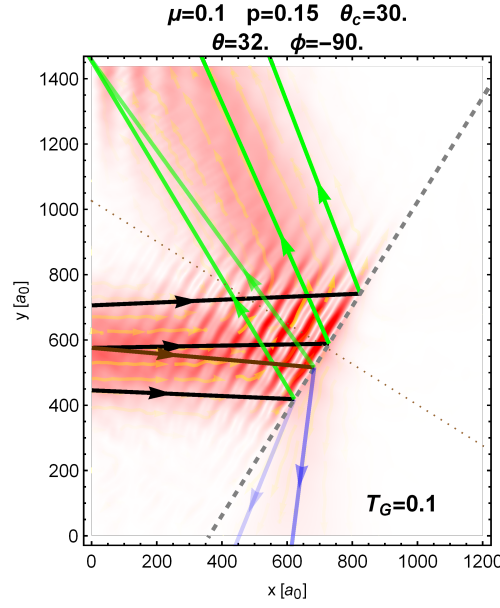
#### 4. RESULTADOS NUMÉRICOS Y ANÁLISIS



**Figura 4.7:** Comparación de los coeficientes de Transmisión y Reflexión semiclásicos y calculados con funciones de Green. En las figuras (a) y (b) la corriente se calcula con las mismas condiciones de inyección en el sistema. En (a) se muestran los coeficientes calculados a partir de las expresiones clásicas, y en (b) se muestran los calculados a partir del método de funciones de Green, donde  $T_G$  se calculó con el contacto verde y  $R_G$  con el contacto violeta. Lo mismo ocurre con las figuras (c) y (d). Nótese que los coeficientes de reflexión concuerdan aproximadamente, considerando la corriente transmitida entre  $S$  y  $D$ .

### 4.2.2. Ángulo crítico y difracción del haz

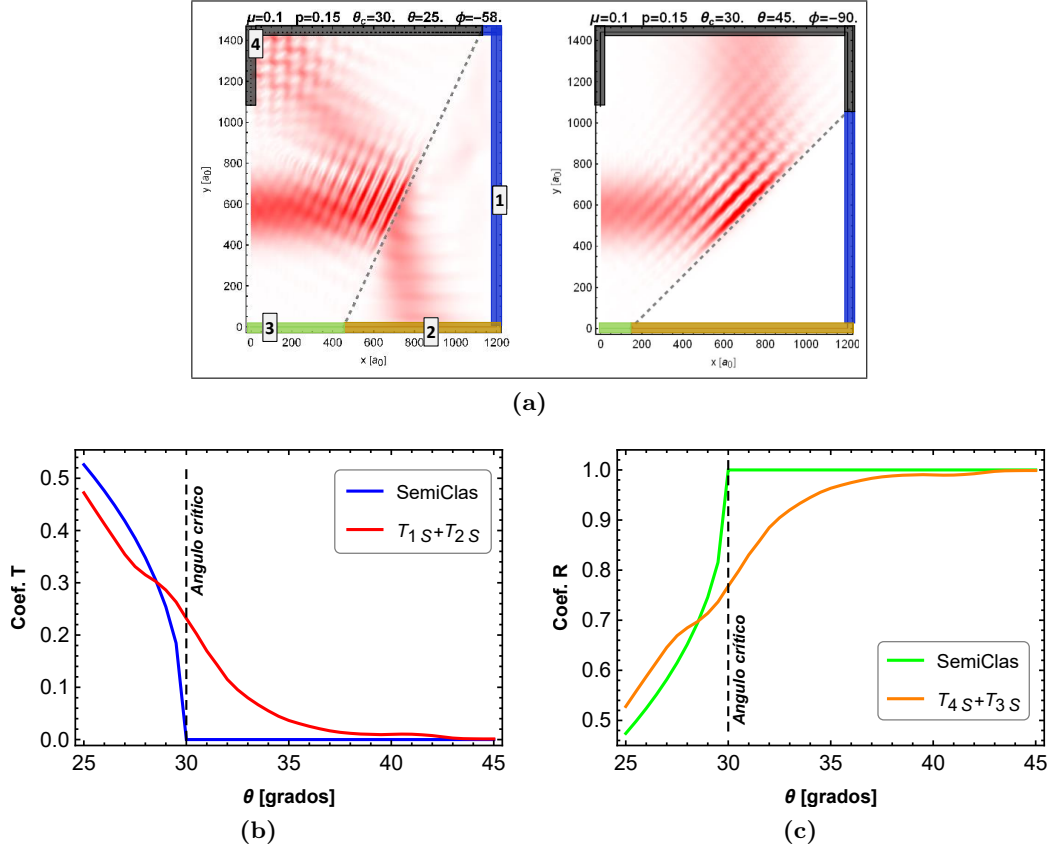
Al no tener un dopaje simétrico, se puede llegar a la condición del ángulo crítico (3.20), donde a partir de este ángulo incidente la transmisión de una región a otra es nula (tal como en la óptica clásica).



**Figura 4.8:** Ángulo de incidencia sobre el ángulo crítico ( $\theta_c = 30^\circ$ ). Se observa que aún hay transmisión hacia el contacto 2 ( $T_G > 0$ ), a pesar de estar por encima del ángulo crítico. Los rayos incidentes delimitan la difracción del haz incidente y los haces transmitidos son calculados numéricamente.

Si el sistema tiene una energía de inyección  $\mu = 0.1$  y un potencial  $p = 0.15$ , el ángulo crítico es  $\theta_c = 30^\circ$  desde la LSE (ver ecuación (3.20)). Cuando se inyecta en un ángulo de incidencia de  $\theta = 32^\circ$  (ángulo de incidencia mayor al ángulo crítico), aún la transmisión calculada del contacto  $S$  al contacto 2 es no nula, como se muestra en la figura 4.8. Esto es porque hay difracción en el haz de electrones incidente, pues como se dijo antes,  $\theta$  corresponde al ángulo del rayo central (representa a los electrones de la mitad del haz); los electrones con ángulos incidentes superiores al central, no se transmiten a la región  $p$ , sin embargo, algunos electrones aún se están transmitiendo. Para este caso, los electrones que tienen una desviación angular de  $\Delta\theta = -2^\circ$  respecto al ángulo central  $\theta = 32^\circ$  son los que aún se transmiten; estos electrones corresponden a los que se encuentran en el extremo inferior del haz. Además, dado que se inyecta con un perfil gaussiano y por la difracción, algunos electrones de la parte central de la inyección pueden incidir a la interfaz con ángulo distinto de  $\theta$  (véase el rayo incidente café en la figura 4.8 para observar esto).

#### 4. RESULTADOS NUMÉRICOS Y ANÁLISIS



**Figura 4.9:** Transmisión de la región  $n$  a la  $p$  cerca del ángulo crítico. En (a) se muestran los cuatro contactos definidos para calcular los coeficientes  $T_G$  y  $R_G$ , donde los contactos se redefinen dependiendo del ángulo de incidencia; se muestra la etiqueta de los contactos. En (b) y (c), se hace la comparación de los coeficientes de transmisión y reflexión semi-clásicos (SemiClas) y obtenidos numéricamente con NEGF usando (4.3) (contactos 1 y 2 para transmisión y contactos 3 y 4 para reflexión). Las discrepancias de las curvas se explican por la difracción del haz incidente, que generan ángulos distintos de incidencia para los electrones del haz.

Para determinar el ángulo de incidencia en el cuál la transmisión de electrones de la región  $n$  a la  $p$  se anula, se hace una redefinición de los contactos (véase figura 4.9a). Para el caso de  $\theta = 25^\circ$  se define el contacto 1 como el contacto  $D$  unido al borde superior que se encuentra en la región  $p$ , los contactos 2 y 3 como el borde inferior que está en la región  $p$  y  $n$ , respectivamente, y finalmente el contacto 4 como el borde superior en la región  $n$  y la región donde llega el haz reflejado para; cuando el ángulo de incidencia cambia, los contactos se redefinen para cubrir de forma similar los bordes (véase figura 4.9a derecha). De esta forma, se utilizan los contactos 1 y 2 para calcular  $T_G$  y los contactos 3 y 4 para calcular  $R_G$  a partir de (4.3). En las figuras 4.9b y 4.9c se presentan las comparaciones entre los coeficientes de transmisión y reflexión, respectivamente, entre las expresiones semi-clásicas y las expresiones (4.3). De la gráfica

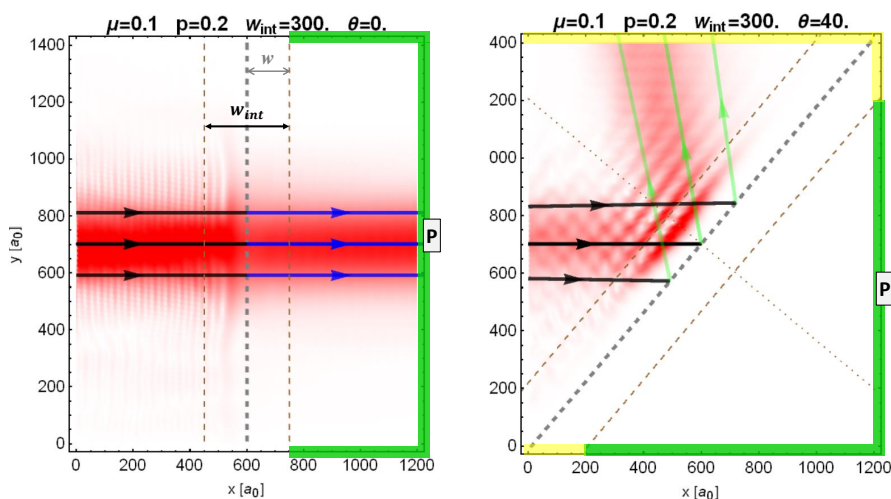
4.9b se obtiene que la transmisión de electrones de la región  $n$  a la región  $p$  se anula aproximadamente en  $\theta = 40^\circ$ .

### 4.3. Interfaz con potencial suave

En el estudio de la interfaz con potencial suave (perfil lineal), es necesario cumplir con la condición (3.16)

$$\lambda_F \ll w,$$

donde  $w$  es el ancho de la interfaz que va de la región  $n$  (con potencial  $n = 0$ ) hasta el límite donde el potencial es iguala a la energía  $\mu$ , y también de la que va desde  $\mu$  hasta la frontera de la interfaz con la región  $p$  (véase figura 4.10 izquierda); esta condición es requerida para que el electrón perciba el cambio del potencial en la interfaz. De este modo, el ancho de la interfaz  $w_{int}$  está dada como  $w_{int} = 2w$ .



**Figura 4.10:** Interfaz con potencial suave, con un ancho  $w_{int} = 300 = 3.18\lambda_{F,0.1}$ . Las líneas discontinuas cafés delimitan la interfaz y la línea gris indica cuando el potencial de dopaje alcanza el valor  $\mu$ . Se muestra el flujo de corriente para  $\theta = 0^\circ$  y  $\theta = 40^\circ$ . En el caso de incidencia normal, la transmisión es total, mientras que para  $\theta = 40^\circ$  no hay transmisión para la región  $p$ . El contacto verde, llamado *contacto P*, es el utilizado para medir la transmisión con (3.23), para cada caso.

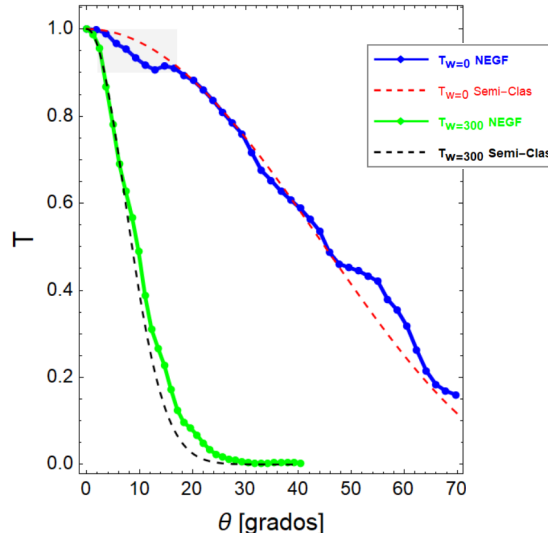
En la figura 4.10 se muestra el flujo de corriente en una nanocinta que posee una interfaz con potencial suave y un dopaje simétrico para dos ángulos de incidencia distintos; las líneas discontinuas cafés marcan el límite entre la región  $n$  y  $p$  con la interfaz, y la línea gris situada en la mitad de la interfaz indica las posiciones donde el potencial de dopaje tiene el mismo valor que la energía de los electrones inyectados (véase línea punteada gris en el perfil del potencial suave de la figura 3.6b). Se observa que para



#### 4. RESULTADOS NUMÉRICOS Y ANÁLISIS

incidencia normal, el haz transmitido sigue la LSE, mientras que para  $\theta = 40^\circ$  no hay transmisión y los rayos reflejados siguen la ley de reflexión de la óptica geométrica. Para este sistema, el ancho de la interfaz corresponde a  $w_{int} = 300$  (42.6 nm), que equivale a una longitud de  $w_{int} = 3.18\lambda_{F,0.1}$ <sup>9</sup>. La razón por la cual el ancho de la interfaz es sólo 3.18 veces la longitud de onda de Fermi de los electrones incidentes es que, dado que se están haciendo cálculos numéricos, el tamaño del sistema no puede ser demasiado grande<sup>10</sup> (está limitado a la capacidad computacional que tiene acceso el autor); sin embargo, la transmisión calculada con NEGF concuerda de buena forma con la expresión del coeficiente de transmisión analítico (3.23) para potencial suave (véase figura 4.11).

Para calcular el coeficiente de transmisión  $T$ , utilizando NEGF, se utiliza un contacto que cubre todo el borde de la región  $p$  (llamado *contacto P*), y que se redefine para cada ángulo de incidencia. En la figura 4.10 se traza dicho contacto en verde, para los dos ángulos de incidencia mostrados; se observa que la transmisión para incidencia normal es total, mientras que para  $\theta = 40^\circ$  la transmisión es nula a la región  $p$ . Por esta razón, se calcula el coeficiente de transmisión solamente en el rango  $\theta \in [0^\circ, 40^\circ]$ .



**Figura 4.11:** Coeficiente de transmisión en función del ángulo de incidencia  $\theta$ . Se muestra el coeficiente de transmisión calculados con NEGF en  $\theta \in [0^\circ, 40^\circ]$  para la interfaz con potencial suave de ancho  $w_{int} = 3.18\lambda_{F,0.1} = 300$ ; además, en el rango  $\theta \in [0^\circ, 70^\circ]$  para la interfaz con potencial abrupto ( $w_{int} = 0$ ). Se comparan estos valores con los descritos por la expresiones semiclásicas.

<sup>9</sup> $\lambda_{F,0.1} = 13.38$  nm es la longitud de onda asociada a la energía de inyección  $\mu = 0.1$ , obtenida a partir de (3.32).

<sup>10</sup>Para el tamaño que tienen las nanocintas que se estudian ( $L_x = 170$  nm y  $L_y = 200$  nm), se está trabajando con cerca de 1.5 millones de átomos

Considerando la expresión semiclásica (3.23), se calcula el coeficiente de transmisión para el potencial suave en el intervalo antes mencionado. Por otra parte, se calcula con (4.3) el coeficiente de transmisión  $T_G$  usando el contacto  $P$  (se colocan contactos en el resto de los bordes de la interfaz para normalizar  $T_G$ , como los contactos amarillos de la figura 4.10 derecha) para distintos ángulos en el intervalo. En la figura 4.11 se muestra el resultado del cálculo de coeficiente  $T_G$ , y se compara con el valor semiclásico analítico  $T$ . Aunque el ancho de la interfaz sólo es 3.18 veces la longitud de onda  $\lambda_{F,0.1}$ , las curvas para el coeficiente de transmisión obtenidas por los dos métodos concuerdan.

Se realiza la misma investigación para el coeficiente de transmisión para el potencial abrupto ( $w_{int} \rightarrow 0$ ); el intervalo de este estudio es en  $\theta \in [0^\circ, 70^\circ]$ , por el ancho del haz incidente<sup>11</sup>. Se presenta una anomalía en las curvas obtenidas para el potencial abrupto para ángulos en el rango  $\theta \in [2^\circ, 17^\circ]$  (indicado en un rectángulo gris en la figura 4.11), pues la curva obtenida con cálculos numéricos está por debajo de la curva analítica. Esto es por corrientes espurias que surgen en este rango (véase figura 4.5 superior izquierda), pero que quedan fuera de las investigaciones de esta tesis, y sigue de trabajo a futuro.

Es de notar que para la interfaz suave la transmisión se anula cerca del ángulo  $\theta = 30^\circ$ , mientras que para el potencial abrupto la transmisión persiste para todos los ángulos medidos. De esta forma, la LSE para el potencial suave se limita a ciertos ángulos de incidencia. Además, para ambas interfaces, la transmisión es total para incidencia normal, debido a la ausencia de retrodispersión. Esto da pie a que con la interfaz suave, se pueda construir un filtro que sólo permite pasar electrones con incidencia normal o ángulos cercanos a ésta.

---

<sup>11</sup>No se puede medir la transmisión para  $\theta > 70^\circ$ , ya que en esta situación, la inyección del haz se hace tanto en la región  $n$  como en la  $p$ .



---

## Capítulo 5

# Conclusiones

---

Esta tesis está dedicada al estudio del transporte electrónico en heterouniones de grafeno realizadas a partir de un potencial electrostático, donde se trabajó particularmente con uniones  $pn$ . Las investigaciones realizadas fueron con uniones  $pn$  con interfaz abrupta y suave. Partiendo de la hipótesis de que el flujo de corriente en las uniones podía ser descrito por óptica geométrica en la interfaz entre regiones, se comparó la corriente con la aproximación semiclásica de la óptica geométrica (ley de reflexión y la LSE -ecuación (3.19)-), donde la propagación de los electrones esta aproximada por trayectorias de partículas puntuales (en analogía de haces de luz).

Para realizar el cálculo numérico de la corriente en las uniones de grafeno, se hizo la aproximación de amarre fuerte para obtener el Hamiltoniano del nanosistema, y se aplicó el método de funciones de Green fuera de equilibrio (NEGF) para haces de electrones que fueron inyectados en un borde de la nanocinta. Los electrones inyectados (descritos por la aproximación de Dirac) fueron mediante un haz de ancho finito.

Variando los parámetros involucrados en la LSE, como el ángulo de incidencia y el potencial aplicado a la región  $p$ , se mostró en general la validez de esta expresión semiclásica con el flujo de corriente en la unión  $pn$ , como se observa en las figuras 4.5 y 4.6. Sin embargo, se observaron efectos adicionales por la naturaleza ondulatoria de los electrones y el ancho finito del haz inyectado. Se encontró un patrón ondulatorio cerca de la interfaz, como se observa en la figura 4.2a, producto de la interferencia del haz de electrones incidente y el haz reflejado en la interfaz. También, se obtuvo difracción del haz electrónico, como se puede ver en las figuras 4.3(a-c), producida por el comportamiento ondulatorio de los electrones en éste. Se observó transmisión más allá del ángulo crítico predicho por la LSE (véase figura 4.9b), que se explica por la difracción del haz incidente, que causa que los electrones del haz incidan a la interfaz con un ángulo más pequeño a  $\theta$ .

Además de comparar las trayectorias electrónicas entre la corriente calculada y la LSE, se realizó una comparación con los coeficientes de reflexión y transmisión, en-

## 5. CONCLUSIONES

---

tre los valores obtenidos por las expresiones semiclásicas y las obtenidas con NEGF. Considerando los efectos del ancho finito del haz inyectado, las dos teorías concuerdan aproximadamente, tanto para las uniones con interfaz abrupta como para las que tienen interfaz suave; véanse las figuras 4.7 y 4.11.

Con las uniones  $pn$  con interfaz abrupta se lograron realizar guías de haces de electrones para las distintas regiones de la unión (véase figuras 4.5 y 4.6), divisores de haz (véase figura 4.1a), haces enfocados (véase 4.3c) y colimadores (con heterouniones en grafeno formadas por uniones  $pn$ , véase figura 4.3d). Con las uniones  $pn$  con interfaz suave (considerando un dopaje simétrico), por los valores obtenidos para el coeficiente de transmisión en función del ángulo de incidencia, es posible realizar filtros de corriente para ángulos cercanos a la incidencia normal. Todos estos dispositivos son válidos e interesantes para controlar y manipular el flujo local de corriente en nanodispositivos de grafeno. Además, cabe mencionar que es posible tener de forma experimental una imagen cuántica del flujo de corriente en nanocintas de grafeno [36].

Dentro del panorama de trabajo a futuro se encuentran las investigaciones de las corrientes espurias generadas en ángulos pequeños (véase figura 4.5 superior derecha), así como la dispersión entre los valles  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  debido un potencial muy abrupto que romperá la simetría de la subred. Además, se quieren extender los estudios de las heterouniones en grafeno hacía las heterouniones circulares, que se han realizado recientemente de forma experimental con grafeno para realizar lentes de Veselago circulares [8]. De ahí, realizar estudios de heterouniones circulares en nanocintas de grafeno con deformaciones circulares, que se especula se pueden lograr ambos efectos (deformación y dopaje) con una punta de un microscopio de efecto túnel (STM).

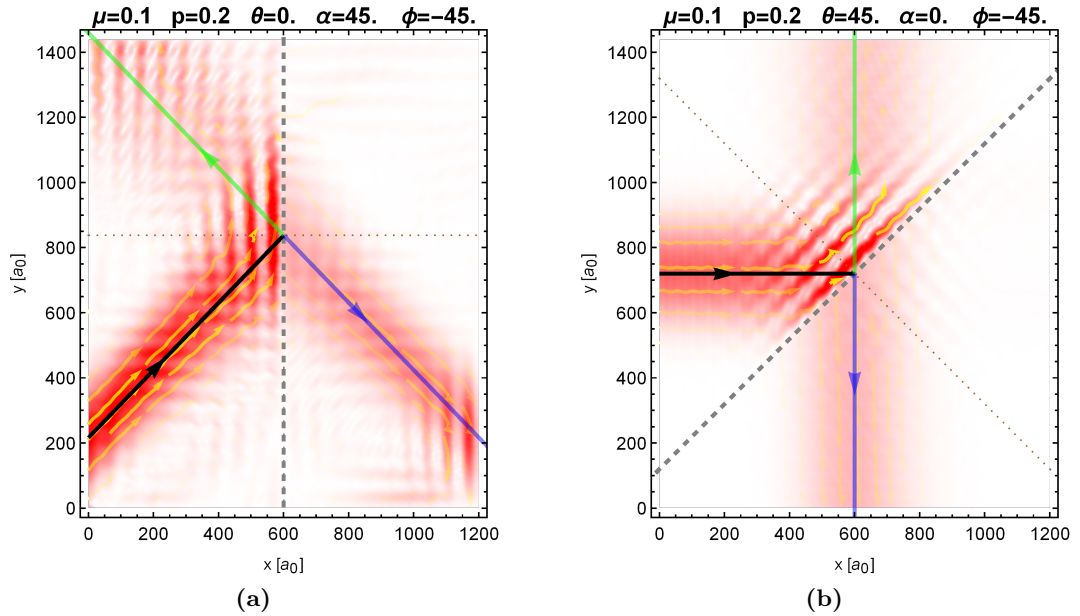
---

## Apéndice A

### Equivalencia del ángulo incidente

---

A continuación, se presenta la equivalencia del ángulo incidente entre las dos situaciones siguientes: inyectar con un ángulo determinado y mantener la interfaz vertical, e inyectar de forma horizontal y mover la interfaz al ángulo que se requiere.



**Figura A.1:** Equivalencia del ángulo. En (a) varía el ángulo de inyección del haz  $\alpha$  para que éste incida en la interfaz dicho ángulo. En (b) se varía el ángulo de la interfaz  $\theta$ , inyectando horizontalmente ( $\alpha = 0^\circ$ ) el haz a la nanocinta. Obsérvese que en ambos casos, la LSE se cumple cualitativamente. Nótese que el patrón de interferencia persiste.

Sea  $\alpha$  el ángulo de inyección del haz incidente a la interfaz y  $\theta$  el ángulo de la interfaz (como en la figura 3.11b). En la figura A.1 se muestran los dos casos de incidencia a la interfaz por el haz inyectado.

En la figura A.1a se inyecta el haz de electrones con un ángulo  $\alpha = 45^\circ$ , de modo que la parte central del haz llega con el mismo ángulo a la interfaz, que está en

## A. EQUIVALENCIA DEL ÁNGULO INCIDENTE

---

posición vertical ( $\theta = 0^\circ$ ). Para este caso, el vector de onda incidente se tiene como  $\mathbf{q}_1 = \mu/\hbar v_F (\cos \alpha, \text{sen} \alpha)$ , y los vectores transmitido y reflejados se siguen de (3.17), al sustituir  $\theta$  por  $\alpha$  ( $\phi$  se obtiene de la LSE). Por otra parte, en la figura A.1b se inyecta el haz de electrones en dirección horizontal ( $\alpha = 0^\circ$ ), mientras que el ángulo de la interfaz se hace  $\theta = 45^\circ$ . Por ende, para este caso el vector incidente es de  $\mathbf{q}_2 = \mu/\hbar v_F (1, 0)$ , por lo que los vectores transmitido y reflejado se tienen como  $\mathbf{q}_{r2} = \mu/\hbar v_F (-\cos(2\theta), \text{sen}(2\theta))$  y  $\mathbf{q}_{t2} = (\mu - p)/\hbar v_F (\cos(\theta - \phi), \text{sen}(\theta - \phi))$ , donde  $\phi$  se calcula a partir de la LSE (3.19). Para ambos casos, se utiliza el rayo central incidente que va por el centro del haz inyectado. Se observa que en ambas situaciones, tanto el rayo reflejado como el transmitido (que siguen la LSE) van por el centro del haz reflejado y transmitido, respectivamente. Esto, refleja que para ambas situaciones de la figura A.1 se asigna el ángulo de incidencia de  $45^\circ$  respecto a la normal de la interfaz.

Pues que se cambia el ángulo de la interfaz y no el ángulo de inyección, entonces la invariancia traslacional del potencial debe ser en la dirección paralela a la interfaz. Sin embargo, dado que se en este trabajo se modela numéricamente un sistema finito, la invariancia traslacional se cumple cuando no se está muy cerca de los bordes.

En la figura A.1a, el punto donde el haz incide en la interfaz es más cercano al borde superior de la nanocinta. Esto genera que el haz reflejado tenga interferencia con la corriente reflejada por el borde superior. Esta es otra razón por la que se optó por cambiar el ángulo de la interfaz, como en la figura A.1b.

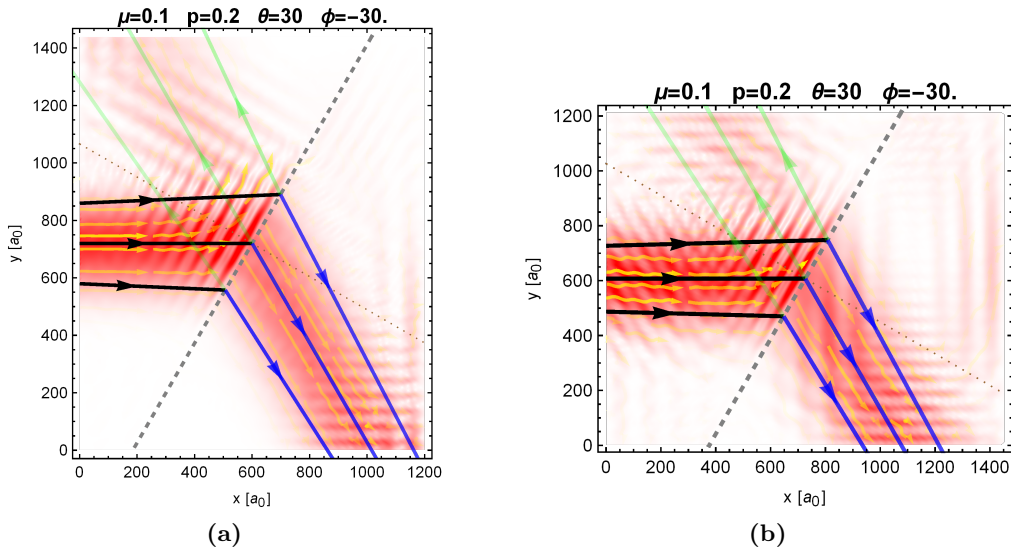
---

## Apéndice B

### Tamaño de la nanocinta

---

A continuación se varía el tamaño de la nanocinta y se muestran las consecuencias de esto.



**Figura B.1:** Efectos de las dimensiones de la cinta. Mientras  $L_y$  sea menor, las interacciones con los contactos 1 y 2 son más intensas, ya que estos contactos están más cerca de la zona donde el haz incide en la interfaz. Con las mismas condiciones de inyección y dopaje, en (a) la longitud  $L_y$  es  $L_y = 1439$  y en (b) es  $L_y = 1214$ .

En la figura B.1 se presentan dos nanocintas con distinto tamaño. La primera nanocinta, mostrada en la figura B.1a, es la utilizada en todos los resultados del capítulo 4 Resultados numéricos y análisis; la segunda nanocinta, presentada en la figura B.1b, sufre una reducción en la dirección  $y$  y un aumento en la dirección  $x$  respecto a la primera nanocinta. Por la reducción de tamaño en la dirección  $y$ , los contactos 1 y 2 están más cerca de la zona donde el haz incide en la interfaz<sup>1</sup>. Por la cercanía de los bordes, en estos se generan reflexiones que tienen interferencias significativas con los

<sup>1</sup>Notar que el ancho del haz depende tanto de  $L_y$  como de  $L_x$ . Véase ecuación (3.35).



## B. TAMAÑO DE LA NANOCINTA

---

haces reflejado y transmitido; esto complica definir la forma de los haces. El tener los contactos más alejados de la región de incidencia, permite que los haces reflejado y transmitido tengan una menor interacción con éstos, disminuyendo la influencia de los bordes en la corriente que se grafica. Por ello, se toma el caso de la figura B.1a, con la longitud en  $y$  lo más grande posible, para hacer la comparación de la corriente con la LSE.

Puesto que el cambio de dimensiones en la nanocinta sigue cumpliendo la condición de tamaño (4.2), la corriente cuántica se sigue describiendo por la LSE (véase figura B.1b).

El tamaño de la nanocinta está determinado por la capacidad de computo a la que tiene acceso el autor. Para los cálculos presentados en este trabajo el tamaño de las nanocintas es de  $170\text{nm} \times 200\text{nm}$ .

# Bibliografía

---

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306(5696):666–669, oct 2004. DOI: 10.1126/science.1102896. [1](#)
- [2] A. H. Castro-Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, 81(1):109–162, jan 2009. DOI: 10.1103/revmodphys.81.109. [1](#), [11](#), [12](#), [14](#), [15](#), [16](#), [24](#)
- [3] E. Kasper and C. Klingshirn, editors. *Optical Properties. Part 3*. Springer Berlin Heidelberg, 2007. DOI: 10.1007/978-3-540-47055-7. [1](#)
- [4] Y. Betancur-Ocampo. Controlling electron flow in anisotropic Dirac materials heterojunctions: a super-diverging lens. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 30(43):435302, Oct. 2018. DOI: 10.1088/1361-648x/aae28a. [1](#), [17](#), [23](#)
- [5] V. V. Cheianov, V. Fal’ko, and B. L. Altshuler. The focusing of electron flow and a Veselago lens in graphene p-n junctions. *Science*, 315(5816):1252–1255, mar 2007. DOI: 10.1126/science.1138020. [1](#), [2](#), [17](#)
- [6] V. V. Cheianov and V. I. Fal’ko. Selective transmission of Dirac electrons and ballistic magnetoresistance of n-p junctions in graphene. *Physical Review B*, 74(4), jul 2006. DOI: 10.1103/physrevb.74.041403. [1](#), [17](#), [20](#), [21](#), [23](#)
- [7] J. R. Williams, T. Low, M. S. Lundstrom, and C. M. Marcus. Gate-controlled guiding of electrons in graphene. *Nature Nanotechnology*, 6(4):222–225, feb 2011. DOI: 10.1038/nnano.2011.3. [1](#), [2](#), [17](#)
- [8] B. Brun, N. Moreau, S. Somanchi, V.-H. Nguyen, K. Watanabe, T. Taniguchi, J.-C. Charlier, C. Stampfer, and B. Hackens. Imaging Dirac fermions flow through a circular Veselago lens. [1](#), [2](#), [52](#)
- [9] L. N. Serkovic-Loli, A. Esparza, A. R. Rodríguez-Gómez, J. P. Franco-Berrones, C. Borja-Hernández, and P. A. Flores-Silva. Transistores de grafeno sobre diferentes dieléctricos y su interacción con ellos. In SMF, editor, *LXI Congreso Nacional de Física*, volume 32, page 8. SMF, Boletín SMF, Oct.

## BIBLIOGRAFÍA

---

2018. URL [https://www.smf.mx/wordpress/wp-content/uploads/2019/01/PROGRAMasCNF18\\_CARTA.pdf](https://www.smf.mx/wordpress/wp-content/uploads/2019/01/PROGRAMasCNF18_CARTA.pdf). ISSN 0187-4713. [1](#)
- [10] K.-K. Bai, J.-J. Zhou, Y.-C. Wei, J.-B. Qiao, Y.-W. Liu, H.-W. Liu, H. Jiang, and L. He. Generating atomically sharp p-n junctions in graphene and testing quantum electron optics on the nanoscale. *Physical Review B*, 97(4), jan 2018. DOI: 10.1103/physrevb.97.045413. [1](#), [18](#)
- [11] B. Guo, L. Fang, B. Zhang, and J. R. Gong. Graphene doping: A review. *Insciences Journal*, pages 80–89, apr 2011. DOI: 10.5640/insc.010280. [1](#), [18](#)
- [12] T. Stegmann. *Quantum transport in nanostructures: from the effects of decoherence on localization to magnetotransport in two-dimensional electron systems*. PhD thesis, Die Universität Duisburg-Essen, 2014. URL [https://duepublico2.uni-due.de/servlets/MCRFileNodeServlet/duepublico\\_derivate\\_00036867/Diss-Stegmann.pdf](https://duepublico2.uni-due.de/servlets/MCRFileNodeServlet/duepublico_derivate_00036867/Diss-Stegmann.pdf). [3](#), [8](#), [14](#), [15](#), [17](#), [24](#), [27](#), [28](#), [29](#)
- [13] S. Datta. *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge University Press, 1995. DOI: 10.1017/CBO9780511805776. [3](#), [27](#), [33](#)
- [14] S. Datta. *Quantum transport: atom to transistor*. Cambridge, 2005. DOI: 10.1017/cbo9781139164313. [3](#), [7](#), [8](#), [28](#)
- [15] S. H. Simon. *Lecture Notes for Solid State Physics*, chapter 7, pages 77–86. Oxford, 2011. URL <https://www-thphys.physics.ox.ac.uk/people/SteveSimon/condmat2011/LectureNotes.pdf>. [3](#)
- [16] M. Pourfath. *Numerical study of Quantum Transport in Carbon Nanotube Based Transistors*. PhD thesis, Die Technischen Universität Wien, 2007. URL <http://www.iue.tuwien.ac.at/phd/pourfath/diss.html>. [4](#)
- [17] L. E. F. Foa-Torres, S. Roche, and J.-C. Charlier. *Introduction to graphene-based nanomaterials: from electronic structure to quantum transport*. Cambridge, 2014. ISBN 978-1-107-03083-1. DOI: 10.1017/cbo9781139344364. [11](#), [12](#), [16](#), [24](#)
- [18] J. E. Barrios-Vargas. *Transporte electrónico en grafeno con desorden*. PhD thesis, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Oct. 2012. URL <http://132.248.9.195/ptd2012/noviembre/0685740/Index.html>. [11](#)
- [19] S. M.-M. Dubois, Z. Zanolli, X. Declerck, and J.-C. Charlier. Electronic properties and quantum transport in graphene-based nanostructures. *The European Physical Journal B*, 72(1):1–24, oct 2009. DOI: 10.1140/epjb/e2009-00327-8. [12](#), [15](#), [16](#)
- [20] Y. Betancur-Ocampo, M. Cifuentes-Quintal, G. Cordourier-Maruri, and R. de Coss. Landau levels in uniaxially strained graphene: A geometrical approach. *Annals of Physics*, 359:243–251, aug 2015. DOI: 10.1016/j.aop.2015.04.026. [13](#)

- 
- [21] T. Stegmann and N. Szpak. Current flow paths in deformed graphene: from quantum transport to classical trajectories in curved space. *New Journal of Physics*, 18, 2015. DOI: 10.1088/1367-2630/18/5/053016. 13, 28, 29, 30
- [22] P. R. Wallace. The band theory of graphite. *Physical Review*, 71(9):622–634, May 1947. DOI: 10.1103/physrev.71.622. 15
- [23] P. W. Atkins. *Quanta: A handbook of concepts (Oxford chemistry series ; 21)*, volume 21 of *Oxford Chemistry Series*. Clarendon Press, 1974. ISBN 978-0-19-855493-6. URL <https://archive.org/details/Quanta-AHandbookOfConcepts/page/n57>. 17
- [24] S. Chen, Z. Han, M. M. Elahi, K. M. M. Habib, L. Wang, B. Wen, Y. Gao, T. Taniguchi, K. Watanabe, J. Hone, A. W. Ghosh, and C. R. Dean. Electron optics with p-n junctions in ballistic graphene. *Science*, 353(6307):1522–1525, Sept. 2016. DOI: 10.1126/science.aaf5481. 17, 20
- [25] G.-H. Lee, G.-H. Park, and H.-J. Lee. Observation of negative refraction of dirac fermions in graphene. *Nature Physics*, 11(11):925–929, sep 2015. DOI: 10.1038/nphys3460. 17
- [26] P. Allain and J. Fuchs. Klein tunneling in graphene: optics with massless electrons. *The European Physical Journal B*, 83(3):301–317, Oct. 2011. DOI: 10.1140/epjb/e2011-20351-3. 19, 20, 21, 22, 23
- [27] G. G. Naumis. Internal mobility edge in doped graphene: Frustration in a renormalized lattice. *Physical Review B*, 76(15), oct 2007. DOI: 10.1103/physrevb.76.153403. 19
- [28] C. W. J. Beenakker. Colloquium: Andreev reflection and klein tunneling in graphene. *Reviews of Modern Physics*, 80(4):1337–1354, oct 2008. DOI: 10.1103/revmodphys.80.1337. 20
- [29] T. T. Heikkilä. *The Physics of Nanoelectronics*. Oxford University Press, jan 2013. ISBN 9780199592449. DOI: 10.1093/acprof:oso/9780199592449.003.0010. 21, 22
- [30] M. Büttiker. Four-terminal phase-coherent conductance. *Physical Review Letters*, 57(14):1761–1764, oct 1986. DOI: 10.1103/physrevlett.57.1761. 27, 28
- [31] F. Covito, F. G. Eich, R. Tuovinen, M. A. Sentef, and A. Rubio. Transient charge and energy flow in the wide-band limit. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 14(5):2495–2504, apr 2018. DOI: 10.1021/acs.jctc.8b00077. 28
- [32] T. Stegmann, D. E. Wolf, and A. Lorke. Magnetotransport along a boundary: from coherent electron focusing to edge channel transport. *New Journal of Physics*, 15(11):113047, nov 2013. DOI: 10.1088/1367-2630/15/11/113047. 28, 29
-

## BIBLIOGRAFÍA

---

- [33] C. J. O. Verzijl, J. S. Seldenthuis, and J. M. Thijssen. Applicability of the wide-band limit in DFT-based molecular transport calculations. *The Journal of Chemical Physics*, 138(9):094102, mar 2013. DOI: 10.1063/1.4793259. 29
- [34] T. Stegmann and N. Szpak. Current splitting and valley polarization in elastically deformed graphene. *2D Materials*, 6, 2018. DOI: 10.1088/2053-1583/aaea8d. 29, 30
- [35] C.-H. Park, Y.-W. Son, L. Yang, M. L. Cohen, and S. G. Louie. Electron beam supercollimation in graphene superlattices. *Nano Letters*, 8(9):2920–2924, sep 2008. DOI: 10.1021/nl801752r. 36, 37
- [36] J.-P. Tetienne, N. Dontschuk, D. A. Broadway, A. Stacey, D. A. Simpson, and L. C. L. Hollenberg. Quantum imaging of current flow in graphene. *Science Advances*, 3(4):e1602429, apr 2017. DOI: 10.1126/sciadv.1602429. 52