



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

MAESTRÍA EN CIENCIAS (FÍSICA)
INSTITUTO DE CIENCIAS FÍSICAS
MATERIA CONDENSADA Y NANOCIENCIAS

TRANSPORTE ELECTRÓNICO EN GRAFENO:
ANALOGÍAS DE LA ÓPTICA DE GRADIENTE DE ÍNDICE
Y UNIONES *PN* CON DEFECTOS

T E S I S
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:
JOSE EMMANUEL PAREDES ROCHA

DIRECTOR DE TESIS
DR. THOMAS WERNER STEGMANN
INSTITUTO DE CIENCIAS FÍSICAS, UNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTORAL
DR. JOSÉ EDUARDO BARRIOS VARGAS
FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM
DR. FRANÇOIS ALLAIN LEYVRAZ WALTZ
INSTITUTO DE CIENCIAS FÍSICAS, UNAM

CUERNAVACA, MORELOS, 2021
NOMIEMBRE



Universidad Nacional
Autónoma de México



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.

*A ti Ana Raquel,
mi compañera de vida durante los últimos 10 años,
que hemos compartido el crecimiento de ambos
hacia ser mejores personas.*

A favor de la Ciencia Abierta, Ciencia para Todxs.

Agradecimientos

Primeramente, al Dr. Thomas Stegmann por ser mi guía, apoyo, respaldo y promotor desde el comienzo, no sólo en el plano académico sino también en el personal. Agradezco enormemente la ayuda y el impulso que siempre me ha brindado a lo largo de este tiempo, además de darme la oportunidad de hacer investigación en este campo tan fascinante de los nanomateriales y motivar esas discusiones tan interesantes. También por hacer posible las numerosas participaciones que tuve en congresos presentando nuestros resultados y promover mi estancia de investigación en el extranjero.

Al Dr. Yonatan Betancur, por siempre estar dispuesto a resolver mis dudas, abrir y participar esas discusiones tan enriquecedoras.

Al Dr. Nikodem Szpak y al Profesor Dietich Wolf por su hospitalidad en mi estancia en la Universidad de Duisburg-Essen, Alemania. También al Dr. Szpak por nuestra fructífera cooperación desde entonces hasta ahora. Muy agradecido con el PAECI UNAM 2019 por el mayor financiamiento de esta estancia de investigación.

Al CONACYT por brindarme la Beca Nacional para posgrado correspondiente al CVU No. 1008686. Este apoyo ha sido crucial para que pudiera realizar esta investigación y obtener mi grado de Maestro en Ciencias Físicas.

A los proyectos CONACYT Ciencia Básica A1-S-13469 y UNAM-PAPITT IA103020 que me han apoyado económicamente para participar en diversos congresos presenciales y virtuales, así como contribuir a mi estancia en Alemania. Particularmente, agradezco al segundo proyecto por brindarme mi beca para poder concluir mi titulación de maestría.

A mi mamá y papá, Amelia Rocha y José Paredes, por sus consejos, amor, soporte y comprensión que me han dado a lo largo de estos 25 años, por darme la oportunidad de desarrollar mi plan de vida a mi gusto y conveniencia; les estoy eternamente agradecido.

A mi hermano Andrés por el cariño, respaldo, impulso y apoyo emocional en este tiempo; gracias por las experiencias compartidas, los consejos y las críticas dadas.

Ana Raquel Alonso V. por su cariño y amor incondicionales e incommensurables; por su comprensión, paciencia y soporte desmedido, así como por sus consejos. Su compañía ha hecho que este proceso sea más llevadero. Crecer y compartir la vida a su lado ha sido la experiencia más bonita.

A mis amigas, amigos y familiares que hicieron más llevadero este tiempo de confinamiento. Sin duda su compañía a la distancia y cercanía fue determinante.

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. CUERNAVACA, MORELOS, 2021

Resumen

En esta tesis se investiga el transporte electrónico balístico a través de uniones pn de grafeno, generadas por compuestas de voltaje y donde este potencial electrostático aplicado puede variar gradualmente. Estos cálculos de transporte electrónico se realizan mediante el método de *funciones de Green fuera de equilibrio* (NEGF) y usando el modelo de amarre fuerte.

Los patrones de flujo de corriente coherente calculados numéricamente pueden ser entendidos en gran medida en términos de trayectorias semiclásicas, equivalentes a las obtenidas para haces de luz en medios con un índice de refracción que cambia gradualmente con la posición. Con las uniones rectas se confirma la Ley de Snell generalizada para electrones. En las uniones suaves, emergen regiones energéticamente prohibidas, las cuales incrementan la reflexión y pueden generar patrones de interferencia pronunciados, por ejemplo, modos de galería susurrante (WGM). Los dispositivos investigados no sólo demuestran la factibilidad de la óptica electrónica de gradiente de índice en uniones pn de grafeno, como es el caso de las lentes de Luneburg y Maxwell generalizada, sino que pueden tener distintas aplicaciones tecnológicas, como por ejemplo divisores de haz, focalizadores o guías de onda de haces de electrones. Las trayectorias semiclásicas ofrecen una eficiente herramienta para estimar el camino del flujo de corriente en estos dispositivos de la nanoelectrónica.

Debido a la viabilidad mostrada recientemente de hacer uniones pn con interfaz abrupta en grafeno, se presenta como estos sistemas por si sólo funcionan como una lente de Veselago, donde reenfocan y coliman los haces de electrones que se les inyectan. Aunado a esto, se muestra que cuando el monocapa de grafeno tiene zonas concentradas de desorden local o deformaciones elásticas fuera del plano, estas uniones pn tienen la capacidad de revertir en gran medida las perturbaciones que estos defectos generan al flujo de corriente de haces de electrones inyectados, siempre que se mantenga una simetría espacial de reflexión respecto a la interfaz de la unión.

Abstract

In this thesis, we investigate the ballistic electron transport in graphene pn junctions, generated by gradually varying electrostatic potentials applied by external gate voltages. We use the *Non-Equilibrium Green's Function* method and the tight-binding model to make the calculations of electron transport.

The numerically calculated coherent current flow patterns can be understood largely in terms of semiclassical trajectories, equivalent to the ones obtained for light beams in a medium with a gradually changing refractive index. For straight junctions, we validate the generalized Snell's Law for electron. In smooth junctions, energetically forbidden regions emerge, which increase reflections and can generate pronounced interference patterns, for example, whispering gallery modes. The investigated devices do not only demonstrate the feasibility of the gradient-index electron optics in graphene pn junctions, such as Luneburg and generalized Maxwell lenses, but may have also technological applications, for example, as beam splitters, focusers or waveguides for electron beams. The semiclassical trajectories offer an efficient tool to estimate the current flow paths in such nanoelectronic devices.

Due to the recent experimental realization of pn junctions with sharp interface in graphene, we present how these systems work as Veselago lenses, which refocus and collimate the injected electron beams. Additionally, we show how these pn junctions can revert largely the distortion of the current flow by defects in graphene, like concentrated zones of local disorder or out-of-plane strain. The condition for achieving this result is the preservation of spatial symmetry with respect to the interface of the junction.

Índice general

Resumen	IV
Abstract	V
1. Introducción	1
2. Fundamentos del Transporte Cuántico	3
2.1. Modelo de amarre fuerte para nanosistemas	3
2.2. Método de funciones de Green fuera de equilibrio (NEGF)	5
2.2.1. Función espectral	5
2.2.2. Función de Green	6
2.2.3. Función de correlación G^n	7
2.2.4. Funciones G y G^n en sistemas cuánticos abiertos	7
2.3. Corriente en sistemas abiertos	10
2.4. Sobre los cálculos del transporte cuántico	11
3. Grafeno y los Efectos de las Uniones pn	14
3.1. Grafeno y las uniones pn	14
3.1.1. Propiedades electrónicas del grafeno con modelo de amarre fuerte	16
3.1.2. Descripción de las uniones pn en grafeno	21
3.2. Trayectorias electrónicas desde la óptica geométrica de gradiente de índice	23
3.2.1. Uniones pn rectas	27
3.2.2. Uniones pn circulares	33
3.2.3. Lentes GRIN en grafeno	40
3.2.4. Geodésicas para las uniones pn en grafeno	43
3.2.5. Conclusiones	44
3.3. Efecto de las uniones pn en grafeno con desorden y deformaciones elásticas	45
3.3.1. Regiones de desorden en uniones pn	46
3.3.2. Deformaciones elásticas en uniones pn	52
3.3.3. Conclusiones	62
4. Conclusiones Generales	64

Referencias	67
Artículos	81

Capítulo 1

Introducción

Los primeros estudios de las propiedades electrónicas en el material denominado grafeno fueron realizadas por Wallace en 1947 [1]. Pero fue hasta su síntesis en 2004 por Novoselov *et al.* [2] que los estudios al respecto de este material tuvieron un disparo muy considerable, siendo uno de los materiales más estudiados en materia condensada; véase la figura 1.1, donde se muestra el número de publicaciones por año registrado en la *Web of Science* relaciona con el grafeno. Además, los estudios alrededor del entendimiento de sus propiedades electrónicas tienen su nicho importante de contribuciones teóricas y experimentales.

El estudio de las uniones pn en grafeno ha tomado relevancia debido a que en el régimen balístico se han podido hacer analogías de efectos de la óptica con los electrones, dando lugar al área de la óptica electrónica. Este comportamiento lo han confirmado en diversas contribuciones teóricas [3–21] y experimentales [22–36], donde además se evidencian dos fenómenos propios de las uniones pn en grafeno: el tunelamiento de Klein y la refracción negativa. Además en años pasados, se ha mostrado que es posible hacer uniones pn con interfaz meramente abrupta [37]. Esto ha permitido el diseño de nuevos dispositivos en la nanoelectrónica, como lo son lentes de Veselago [5, 12, 14, 16, 38–40], fibras ópticas de electrones [24], transistores [10, 18, 35], polarizadores de valle [7, 40], colimadores [8], interruptores [25] y microscopios de fermiones de Dirac [20]. Todas las investigaciones antes mencionadas se han concentrado en las uniones pn rectas o circulares abruptas, dejando de lado a las uniones pn circulares con interfaz suave, teniendo sólo recientemente contribuciones teórico-experimentales [41–43]. Es por ello que uno de los objetivos de esta tesis es abonar al entendimiento del transporte electrónico balístico en las uniones pn circulares suaves desde un punto de vista teórico, además de hacer diversas propuestas para dispositivos nanoelectrónicos que ayuden al control del flujo de electrones en estas uniones pn , tanto rectas como circulares, con interfaz abrupta y suave.

El costo computacional de los cálculos del transporte electrónico en los nanosistemas antes mencionados puede ser muy alto, debido a la gran cantidad de átomos que

componen los sistemas. En esta tesis se contribuye con las trayectorias semiclásicas desde la óptica geométrica de gradiente de índice para estudiar el transporte electrónico en estos nanosistemas, que puede ser una herramienta barata en términos de computo.

También, el experimento reciente sobre uniones pn con interfaz atómicamente abrupta [37] ha hecho factible que éstas puedan utilizarse en el control del flujo de corriente en la nanoelectrónica. Por ello, otro objetivo de esta tesis es presentar las condiciones en las cuales las uniones pn rectas abruptas pueden revertir los efectos del desorden o deformaciones elásticas en grafeno, y contribuir al entendimiento del transporte en este tipo de sistemas.

La estructura de la tesis tienen tres partes. En la primera parte, se describen las motivaciones y ecuaciones necesarias para hacer los cálculos del transporte cuántico, a través del flujo de corriente, usando el método de funciones de Green fuera de equilibrio (NEGF) y el modelo de amarre fuerte (Capítulo 2). Además, se mencionan las condiciones del sistema consideradas para hacer dichos cálculos. En la segunda parte (Capítulo 3) presenta la parte principal de la tesis, donde se describen conceptos sobre las propiedades electrónicas del grafeno y la generación de uniones pn en éste y los resultados de los estudios en ellas. Por un lado, se exponen los resultados de transporte sobre uniones pn rectas y circulares, con interfaz suave o abrupta, y se hace la propuesta de trayectorias semiclásicas para los electrones en ellas. Por otro lado, se estudian los efectos de las uniones pn rectas abruptas en grafeno con desorden o deformaciones elásticas fuera del plano. Finalmente, en la última parte, se presentan las conclusiones generales de los resultados mostrados en esta tesis (Capítulo 4). Adicionalmente, al final de esta tesis se anexan los artículos publicados como resultado de la investigación realizada en el programa de maestría del autor.

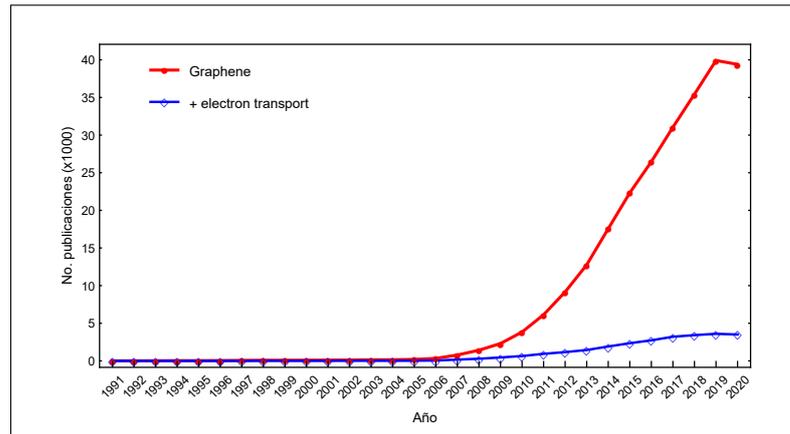


Figura 1.1: Evolución del número de publicaciones registradas en la *Web of Science* con la palabra “Graphene” (rojo) y referente al transporte electrónico en grafeno (azul). Los datos de la curva azul se obtuvieron buscando “Graphene” en conjunto con las frases “electron transport”, “electronic transport” y “electronics”.

Fundamentos del Transporte Cuántico

En este capítulo se hace una introducción breve pero concisa al modelo de amarre fuerte (*tight-binding*) y el método de funciones de Green fuera del equilibrio (NEGF, por sus siglas en inglés), el cual es utilizado en esta tesis para los cálculos del transporte cuántico en nanosistemas. Las ecuaciones aquí presentadas, y sus motivaciones físicas, se siguen de la teoría descrita en extenso en los libros de S. Datta [44, 45], y la síntesis realizada por Stegmann [46]. En particular se motiva el cálculo del flujo de corriente en un nanosistemas, descrito por el modelo de amarre fuerte, para aplicarlo en los próximos capítulos a nanocintas de materiales bidimensionales bajo las situaciones consideradas en este trabajo. También, se mencionan las aproximaciones y consideraciones hechas para el cálculo del transporte cuántico en los nanosistemas de esta tesis.

2.1. Modelo de amarre fuerte para nanosistemas

El modelo de amarre fuerte o *tight-binding* surge como una aproximación para calcular la estructura de bandas electrónicas de moléculas y sólidos. La hipótesis principal de este modelo es la fuerte localización de los estados electrónicos alrededor de los núcleos de los átomos que forman el cristal o nanosistema. Esta localización da paso a poder considerar los orbitales atómicos de átomos aislados y que los electrones en estos estados sólo son perturbados por los vecinos cercanos de este átomo [47, 48].

En la figura 2.1 se muestra un nanosistema (encerrado en una elipse rayada) que tiene N átomos y que estos átomos interactúan con sus vecinos cercanos (indicado con líneas azules). Teniendo en cuenta los orbitales de los átomos aislados ($1s$, $2s$, $2p$, $3s$, $3p$, etc.), si se considera que cada átomo en el nanosistema es descrito por n_o orbitales, entonces el Hamiltoniano de amarre fuerte en primera cuantización se expresa como

$$H = \sum_{\alpha \in \{n_o\}} \sum_i \varepsilon_i^\alpha |i_\alpha\rangle \langle i_\alpha| - \sum_{\alpha, \beta \in \{n_o\}} \sum_{\langle i, j \rangle} (t_{ij}^{\alpha\beta} |i_\alpha\rangle \langle j_\beta| + \underbrace{(t_{ji}^{\alpha\beta})^* |j_\beta\rangle \langle i_\alpha|}_{H.c.}), \quad (2.1)$$

donde $|i_\alpha\rangle$ es el estado electrónico del orbital α en la posición (discreta) \mathbf{r}_i , ε_i^α es la energía de sitio del del estado $|i_\alpha\rangle$ y $t_{ij}^{\alpha\beta}$ es el parámetro de acoplamiento entre los estados $|i_\alpha\rangle$ y $|j_\beta\rangle$. La energía de sitio ε_i^α es la energía que tiene el electrón en el estado $|i_\alpha\rangle$, y que es un corrimiento desde el origen de las bandas de energía que comúnmente se puede llevar cero. El parámetro de acoplamiento $t_{ij}^{\alpha\beta}$ representa la energía de enlace que hay entre los orbitales respectivos, y depende de los tipos de orbitales que se enlazan y la orientación en que lo hacen [48, cap. 5].

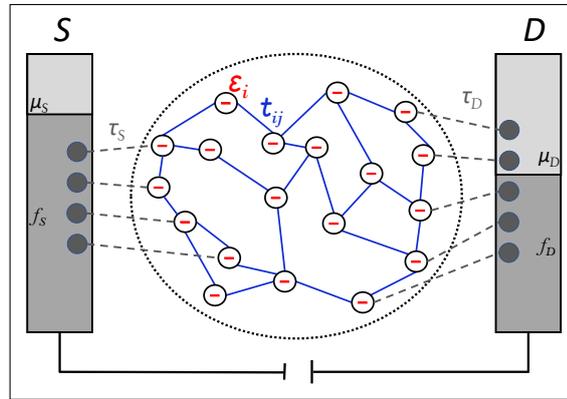


Figura 2.1: Esquema de un nanosistema descrito por el modelo de amarre fuerte, donde se presenta el transporte de electrones en un sistema abierto, conectado al contacto fuente S y al contacto drenaje D ; el transporte es de S a D . Se observa que el sistema es una red simple con energías de sitio ε_i y parámetros de acoplamiento t_{ij} entre los sitios, encerrada por una elipse punteada. f_R y μ_R representan la función de distribución de energía y el potencial químico del reservorio, respectivamente, con $R \in \{S, D\}$. $\tau_{S/D}$ son las matrices de acoplamiento entre el nanosistema y S/D .

De acuerdo con (2.1), la representación matricial del Hamiltoniano de amarre fuerte para el nanosistema es una matriz cuadrada de orden $n_o N$. Ahora, si el nanosistema es un cristal periódico con n_a átomos en la celda unitaria, entonces esta representación matricial se puede reducir a una matriz cuadrada de orden $n_o n_a$. Para los términos del transporte cuántico, en esta tesis sólo se considera un solo orbital atómico por cada sitio de los sistemas (véase ecuación (3.4)), por lo que la forma matricial del Hamiltoniano con que se trabaja es del orden de N (número de sitios en el sistema).

2.2. Método de funciones de Green fuera de equilibrio (NEGF)

En esta sección se hace una introducción concisa de definiciones y conceptos referentes a dos resultados muy importantes del método NEGF, que son la función de Green (2.20) y la función de correlación (2.22b) del nanosistema, cuando éste está abierto a contactos externos. Estas ecuaciones permiten implementar el cálculo numérico del flujo de corriente local en el nanosistema, descrito en la próxima sección.

La idea del no equilibrio viene de que al conectarse el nanosistema a dos contactos externos (fuente y drenaje), como en la figura 2.1, la diferencia entre el potencial químico de los contactos genera un flujo de electrones entre ellos que pasan a través del nanosistema. Debido a esta diferencia, el nanosistema es forzado a balancear el actuar de ambos contactos llevándose a estados fuera de equilibrio intermedios entre el comportamiento del contacto fuente y el contacto drenaje.

2.2.1. Función espectral

La *función espectral* de un nanosistema proporciona la información de los estados electrónicos permitidos, independientemente si están ocupados o no, por lo que se describe como una generalización de la densidad de estados (DOS). Además, contiene la información de la correlación entre estos estados.

Considerando un nanosistema que se conecta a contactos externos (figura 2.1), la función espectral de éste se define a partir de su Hamiltoniano como

$$A(E) := 2\pi\delta(E\mathbb{1} - H), \quad (2.2)$$

donde E es la energía de los electrones inyectados, $\mathbb{1}$ es la matriz identidad (de la dimensión de H) y δ es la función de distribución de Dirac.

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

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

donde \mathbf{r}_i y \mathbf{r}_j son posiciones de los sitios en el sistema. Por esta definición de la función espectral, los elementos de la diagonal representan la densidad local de estados (LDOS)¹, de tal forma que la densidad total de estados, $D(E)$, es la suma de todas las

¹Ya que la LDOS se da por $\rho(\mathbf{r}_i, E) = \frac{1}{2\pi} A(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_i, E)$ y el elemento matricial que corresponde al i -ésimo sitio del sistema está dado por $\rho_i = |\psi(\mathbf{r}_i)|^2$, siendo $|\psi\rangle$ el estado estacionario del sistema.

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

Considerando un sistema que está conectado a reservorios externos (figura 2.1), la función de Green del sistema $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ se puede ver como la respuesta (función de onda) que se tienen el punto \mathbf{r} debido a una excitación en el punto \mathbf{r}' , donde ésta puede ser dentro o fuera del sistema (de aquí su poder en la descripción de sistemas abiertos); para el transporte sin interacciones, las excitaciones se consideran sólo de ondas provenientes de los contactos. Por ello, esta función de Green permite describir la dinámica de los electrones cuando son inyectados y se encuentran dentro del sistema.

Las definiciones de la función de Green retardada (llamada también simplemente función de Green) G y avanzada G^\dagger (la adjunta)³ del sistema se siguen de la solución de la ecuación

$$[(E + i\nu)\mathbb{1} - H]G = \mathbb{1}, \quad (2.5)$$

y la conjugada transpuesta de ésta, donde ν es un número infinitesimal positivo, $\nu \rightarrow 0^+$, y $\mathbb{1}$ es la matriz identidad de la dimensión del sistema. El término $i\nu$ está relacionado con que el nanosistema se conecta a reservorios, como se discutirá mas adelante⁴.

Las funciones de Green están relacionadas con la función espectral A , pues la función de distribución de Dirac de (2.3) se puede representar (considerando el límite cuando $\nu \rightarrow 0^+$) como

$$2\pi\delta(E - \epsilon_n) = \frac{2\nu}{(E - \epsilon_n)^2 + \nu^2} = i \left(\frac{1}{E - \epsilon_n + i\nu} - \frac{1}{E - \epsilon_n - i\nu} \right). \quad (2.6)$$

Con esta representación para δ , la función espectral se puede escribir como

$$A(E) = 2\pi\delta(E - H) = i \left(\underbrace{[(E + i\nu)\mathbb{1} - H]^{-1}}_G - \underbrace{[(E - i\nu)\mathbb{1} - H]^{-1}}_{G^\dagger} \right) = -2 \text{Im}(G). \quad (2.7)$$

Con la relación entre las funciones A y G , de las ecuaciones (2.3) y (2.7) se obtiene que la LDOS en la posición \mathbf{r}_i , $D(E, \mathbf{r}_i)$, en términos de la función de Green del sistema

²Las posiciones \mathbf{r} y \mathbf{r}' son generalmente posiciones continuas (por ello es que no tienen subíndice que indica un sitio discreto).

³La diferencia entre la función de Green retrasada y avanzada radica en la dirección de propagación desde el punto de excitación; para la primera, la onda va desde el punto de excitación, y para la segunda, desaparece en dicho punto.

⁴Además, $i\nu$ es un artificio matemático para asegurar la convergencia de la transformada de Fourier de la función de Green [45].

se expresa como

$$D(E, \mathbf{r}_i) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} (G_{ii}(E)) \quad (2.8)$$

donde $G_{ii}(E) = \langle \mathbf{r}_i | G(E) | \mathbf{r}_i \rangle$ es un elemento sobre la diagonal de la función de Green del sistema en su forma matricial. Puesto que la LDOS debe ser siempre positiva, se infiere que los elementos de la diagonal de la función de Green deben cumplir que $\text{Im} (G_{ii}(E)) < 0$.

2.2.3. Función de correlación G^n

La función de correlación G^n para los electrones de un nanosistema da la correlación o relación de fase que hay entre los estados permitidos de éste; además, esta función es una generalización del número de ocupación de los estados. Siendo $|\psi\rangle$ el estado del nanosistema, la función de correlación se define como

$$G^n = 2\pi |\psi\rangle \langle \psi|. \quad (2.9)$$

Además, si se evalúa esta expresión las posiciones \mathbf{r}_i y \mathbf{r}_j ,

$$G_{ij}^n := 2\pi |\psi(\mathbf{r}_i)\rangle \langle \psi(\mathbf{r}_j)|, \quad (2.10)$$

se puede ver como esta función da la correlación de la función de onda en estas posiciones \mathbf{r}_i y \mathbf{r}_j ; para el caso $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_j$, se observa que $G_{ii}^n = 2\pi |\psi(\mathbf{r}_i)|^2$ da la densidad de probabilidad (o densidad de electrones) asociada a dicha posición (salvo el factor 2π).

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

$$G_{eq}^n(E) = A(E)f(E - \mu), \quad (2.11)$$

donde $A(E)$ es la función espectral.

2.2.4. Funciones G y G^n en sistemas cuánticos abiertos

Para estudiar el transporte electrónico en un nanosistema, se requiere conectarlo a una fuente donde se inyectan los electrones y a un drenaje que los recolecte. Con esta idea, en lo que sigue se darán las motivaciones físicas para obtener la función de Green y la función de correlación del nanosistema conectado a los contactos/reservorios. Por simplicidad, se considerará en este caso sólo un contacto drenaje, pero el nanosistema puede estar conectado a más de un contacto de este tipo.

En la figura 2.1 se presenta un nanosistema descrito por un Hamiltoniano H conectado a un contacto fuente S y un contacto drenaje D . Estos reservorios tienen

un equilibrio local, por lo que sus estados ocupados siguen la distribución de Fermi $f_{S/D} := f(E - \mu_{S/D})$, donde $\mu_{S/D}$ es el potencial químico correspondiente al reservorio. Adicionalmente, el voltaje V que se aplica entre los contactos cumple con la relación $\mu_S - \mu_D = eV$, siendo e la carga del electrón, de tal forma que la diferencia entre f_S y f_D pone al nanosistema fuera del equilibrio.

La conexión de los contactos al nanosistema se describe mediante la matriz de acoplamiento $\tau_{S/D}$, donde esta matriz define qué sitios del contacto están acoplados a qué sitios del nanosistema y con qué parámetro de acoplamiento. Además, se puede suponer que sólo los sitios de la superficie del contacto se conectan al nanosistema, de modo ahora los contactos tienen un tamaño finito. Esta suposición se respalda de que las interacciones de los contactos con el nanosistema se describen por un potencial efectivo Σ denominado *autoenergía* del contacto (que es no hermitiano). En la figura 2.1 las matrices de acoplamiento $\tau_{S/D}$ se representan mediante líneas rayadas grises que indican qué sitios del nanosistema son acoplados a los sitios de superficiales del contacto.

Cuando un reservorio se conecta al nanosistema sufre también perturbaciones. Por un lado, se comienzan a extraer electrones para ser inyectados al nanosistema, y por otro lado, son reinyectados electrones por fuentes externas para mantener el potencial químico del reservorio constante. Este proceso se describe a continuación, con el fin de conocer como es la interacción efectiva de los contactos con el nanosistema.

Los contactos son descritos mediante los Hamiltonianos H_R , con $R \in \{S, D\}$. Cuando estos contactos están aislados, siguen las ecuaciones de Schrödinger

$$(E\mathbb{1}_R - H_R) |\Phi_R\rangle = 0_R \quad (2.12)$$

(el subíndice R indica que la matriz tiene la dimensión del contacto). Al perturbarse por la conexión al nanosistema, y comenzar con la extracción y reinyección de electrones, las ecuaciones de Schrödinger se reescriben como

$$(E\mathbb{1}_R - H_R + i\nu\mathbb{1}_R) |\Phi_R\rangle = |Q_R\rangle, \quad (2.13)$$

donde $i\nu\mathbb{1}_R |\Phi_R\rangle$ representa la extracción y $|Q_R\rangle$ la reinyección de los electrones; como se mencionó antes, se considera el límite $\nu \rightarrow 0^+$. La transición entre las ecuaciones (2.12) a (2.13) es más un cambio de punto de vista y se expone enseguida. Teniendo un Hamiltoniano efectivo $H_{ef} = H_R - i\nu\mathbb{1}_R$, los estados en el reservorio son $|\Phi_R(t)\rangle = e^{-itH_{ef}/\hbar} |\Phi_R\rangle = [e^{-itH_R/\hbar} |\Phi_R\rangle] [e^{-\nu t/\hbar}]$; el primer término es una propagación hermitiana y el segundo es un decaimiento exponencial, por lo que la parte $i\nu |\Phi_R\rangle$ es una pérdida en el contacto, y para compensar la ecuación $|Q_R\rangle$ representa una ganancia, que por el equilibrio de los reservorios, $i\nu |\Phi_{S/D}\rangle = |Q_{S/D}\rangle$. En la ecuación (2.13), E es la energía de excitación del contacto hacia el nanosistema [45], es decir, la energía a la que se inyecta el electrón desde el contacto. Los electrones extraídos del contacto se extienden por el nanosistema y excitan sus estados $|\psi\rangle$; estos estados excitados del nanosistema pueden volver al contacto como estados dispersos $|\varphi_R\rangle$. De este modo, la

ecuación de Schrödinger que resulta del sistema acoplado (nanosistema+contactos) es

$$\begin{array}{c} S \\ \text{nanosis} \\ D \end{array} \begin{pmatrix} S & \text{nanosis} & D \\ (E + i\nu)\mathbb{1}_S - H_S & -\tau_S^\dagger & 0 \\ -\tau_S & E\mathbb{1} - H & -\tau_D \\ 0 & -\tau_D^\dagger & (E + i\nu)\mathbb{1}_D - H_D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\Phi_S + \varphi_S\rangle \\ |\psi\rangle \\ |\Phi_D + \varphi_D\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |Q_S\rangle \\ 0 \\ |Q_D\rangle \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

donde para fines prácticos, el tamaño del contacto (infinito inicialmente) se reduce al número de sitios en su superficie. Para obtener una expresión de los estados excitados que se dispersan a los reservorios, se utilizan las filas de los contactos en (2.14), tomando en consideración (2.13), de tal forma que

$$|\varphi_R\rangle = G_R \tau_R^\dagger |\psi\rangle, \quad (2.15)$$

donde $G_R := [(E - i\nu)\mathbb{1}_R - H_R]^{-1}$ son las funciones de Green de los contactos.

Estas expresiones tienen como consecuencia que la fila del nanosistema en (2.14) se expresa como

$$(E\mathbb{1} - H - \Sigma_S - \Sigma_D) |\psi\rangle = |Q\rangle, \quad (2.16)$$

donde las autoenergías de los contactos se definen como

$$\Sigma_R := \tau_R G_R \tau_R^\dagger, \quad (2.17)$$

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

$$|Q\rangle := \sum_R \tau_R |\Phi_R\rangle. \quad (2.18)$$

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

$$|\psi\rangle = G |Q\rangle, \quad (2.19)$$

donde se define la función de Green del nanosistema G como

$$G := (E\mathbb{1} - H - \bar{\Sigma})^{-1}, \quad (2.20)$$

con $\bar{\Sigma}$ como la suma de las autoenergías de todos los contactos conectados al nanosistema. Como se dijo antes, las autoenergías de los contactos actúan como un potencial efectivo de la interacción de éstos con el nanosistema, de modo que ahora el Hamiltoniano efectivo del nanosistema es $H_{\text{ef}} = H + \bar{\Sigma}$, que ya no es Hermitiano. Este hecho implica que la DOS del nanosistema tenga ensanchamientos por el término imaginario; véase [44, cap. 3.6] para saber más.

Con el desarrollo anterior se hace una simplificación de estudiar un sistema acoplado 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. Ahora, se requiere saber como es la expresión de la función de correlación G^n del nanosistema una vez que es conectado a contactos, la cual se infiere que está relacionada con la función de Green del nanosistema (2.20). A continuación se planea dicha expresión.

El ensanchamiento en la DOS se describe por la *matriz de ensanchamiento* Γ que se define como $\Gamma := i(\Sigma - \Sigma^\dagger)$. A partir de este ensanchamiento, se obtiene la función espectral de nanosistema como⁵

$$A := i(G - G^\dagger) = G(\Gamma_S + \Gamma_D)G^\dagger = A_1 + A_2, \quad (2.21)$$

donde las funciones espectrales $A_{1/2} := G\Gamma_{S/D}G^\dagger$ representan la DOS de los electrones provenientes de los contactos S/D dentro del nanosistema⁶. Usando la ecuación (2.9), considerando que los contactos S y D no están acoplados entre sí directamente y que éstos están en equilibrio local, se obtiene la función de correlación del nanosistema G^n como⁷

$$\begin{aligned} G^n &= 2\pi |\psi\rangle \langle \psi| \stackrel{7}{=} G\tau_S(2\pi |\Phi_S\rangle \langle \Phi_S|)\tau_S^\dagger G^\dagger + G\tau_D(2\pi |\Phi_D\rangle \langle \Phi_D|)\tau_D^\dagger G^\dagger \\ &= G\tau_S G_S^n \tau_S^\dagger G^\dagger + G\tau_D G_D^n \tau_D^\dagger G^\dagger \stackrel{(2.11)}{=} G \underbrace{\tau_S A_S \tau_S^\dagger}_{\Gamma_S} G^\dagger f_S + G \underbrace{\tau_D A_D \tau_D^\dagger}_{\Gamma_D} G^\dagger f_D \end{aligned}$$

$$G^n = A_1 f(E - \mu_S) + A_2 f(E - \mu_D), \quad (2.22a)$$

$$G^n = G\Sigma^{\text{in}}G^\dagger, \quad (2.22b)$$

donde se define la función de *inscattering* como

$$\Sigma^{\text{in}} := \Sigma_S^{\text{in}} + \Sigma_D^{\text{in}} = \Gamma_S f_S + \Gamma_D f_D. \quad (2.23)$$

Esta función de inscattering describe como los electrones fluye hacia el nanosistema desde los contactos. Además, nótese que la ecuación (2.22a) es válida para sistemas fuera del equilibrio, por la diferencia en μ_S y μ_D . Puesto que se está en 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 con el nanosistema.

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 (2.14)). Considerando la ecuación de Schrödinger, la evolución temporal del operador de proyección sigue

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle \langle \psi| = [H, |\psi\rangle \langle \psi|], \quad (2.24)$$

⁵(2.21) 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.

⁶No debe confundirse con las funciones espectrales $A_{S/D} := G_{S/D}\Gamma_{S/D}G_{S/D}^\dagger$ que dan la DOS de los electrones en los reservorios y no en el nanosistema

⁷Se usan las expresiones (2.19) y (2.18), y que $|\Phi_{S/D}\rangle \langle \Phi_{D/S}| = 0$ porque no hay acoplamiento entre contactos.

donde H es el Hamiltoniano que describe al nanosistema. Nótese que esta ecuación tiene la forma de una ecuación de continuidad, reflejando una conservación de densidad de probabilidad. Como el nanosistema está conectado a los contactos, donde electrones entran y salen en todo momento, la probabilidad no se puede conservar. Considerando transporte estacionario, la parte temporal de (2.24) se anula y el conmutador proporcional a los electrones que entran y salen del nanosistema, de tal forma que el operador de corriente en éste se puede definir como

$$I^{op} := \frac{ie}{\hbar} [H, |\psi\rangle \langle \psi|] \stackrel{(2.9)}{=} \frac{ie}{\hbar} [H, G^n], \quad (2.25)$$

donde e es la carga del electrón. En su forma matricial, los elementos de la diagonal del operador de corriente

$$I_{ii}^{op} = \frac{ie}{\hbar} \sum_j (H_{ij} G_{ji}^n - G_{ij}^n H_{ji}), \quad (2.26)$$

describen la corriente total que fluye al i -ésimo sitio del nanosistema. Además, los elementos fuera de la diagonal, I_{ij}^{op} , indican la cantidad de corriente que fluye entre el i -ésimo y j -ésimo sitio del nanosistema. De este modo, se puede definir la corriente local entre los sitios del nanosistema como

$$I_{ij}^{loc} = \frac{ie}{\hbar} (t_{ij} G_{ji}^n - t_{ji} G_{ij}^n) = \frac{2e}{\hbar} \text{Im} (t_{ij}^* G_{ij}^n) = \frac{2e}{\hbar} \text{Im} (t_{ij}^* (G \Sigma^{\text{in}} G^\dagger)_{ij}), \quad (2.27)$$

Es posible generar un campo vectorial de la corriente en el nanosistema con este término de corriente local, de modo que

$$\mathbf{I}_{ij}^{loc} = \left(\frac{1}{2} (\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j), I_{ij}^{loc} \hat{\mathbf{r}}_{ij} \right), \quad (2.28)$$

donde $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$ es el vector unitario que va del i -ésimo al j -ésimo sitio; aquí la primera entrada indica la posición inicial del vector y segunda entrada da el valor de dicho vector del campo de la corriente electrónica. Este campo vectorial de la corriente es utilizado para mostrar las figuras de densidad de corriente en el próximo capítulo.

Considerando que se inyectan múltiples electrones desde los contactos al nanosistema, la imagen del operador de corriente local (2.27) da la visualización de de como estos electrones fluyen y se agrupan a través del sistema en una vez, debido a que es transporte estacionario. Esta imagen se puede obtener al localizar la cantidad de corriente local I_{ij}^{loc} en la posición $(\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j)/2$.

2.4. Sobre los cálculos del transporte cuántico

Una vez que se han establecido las ecuaciones para calcular el transporte cuántico mediante el método NEGF y la corriente local en el nanosistema, en esta sección se hace mención de todos las consideraciones en los cálculos de transporte cuántico presentados en los resultados de esta tesis. En particular, se considera al nanosistema como una nanocinta de grafeno, del cual se expone una breve descripción en el próximo capítulo.

En la figura 2.2 se muestra el esquema una nanocinta de grafeno, que es el nanosistema estudiado mayormente en este trabajo. En la figura, se resalta con rojo los sitios de la nanocinta en los cuales se conecta en contacto fuente, por donde se inyectan los electrones, y con tonos azules los sitios que se conectan a los distintos contactos drenaje. Como se puede ver, la inyección de electrones en el nanosistema se hace siempre solamente por el borde izquierdo (zigzag) del nanosistema, y se conectan sólo los sitios de la primera columna. La inyección de los electrones se hace mediante ondas planas y con un perfil gaussiano; de este modo, la función inscattering del contacto fuente es

$$\Sigma_S^{\text{in}} = \sum_{\substack{i,j \in \text{borde} \\ \text{rojo}}} \mathcal{G}(\mathbf{r}_i) \mathcal{G}(\mathbf{r}_j) \Psi_j^*(\mathbf{k}_0) \Psi_i(\mathbf{k}_0) |i\rangle \langle j|, \quad (2.29)$$

donde $\Psi_i(\mathbf{k})$ son los eigenestados del nanosistema, que en el caso del grafeno son expresados por (3.12), $\mathbf{k}_0 = \frac{E}{\hbar v_F}(1, 0)$ es el vector de onda de inyección, con E la energía de inyección (energía de Fermi inicial en la nanocinta) y v_F la velocidad de Fermi de los electrones, y finalmente $\mathcal{G}(\mathbf{r}_i)$ es el perfil gaussiano que sigue la expresión

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}) = e^{-(y-y_0)^2/d_0^2}, \quad (2.30)$$

donde y_0 y d_0 son los parámetros que controlan la posición central y el ancho del haz de electrones inyectado. En este caso, se considera que sólo por este contacto se inyectan electrones, por lo que $\Sigma_D^{\text{in}} = 0$ para los contactos drenaje.

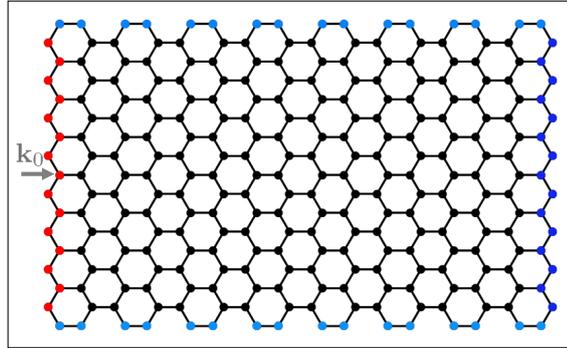


Figura 2.2: Esquema de los sitios conectados a los contactos en la nanocinta de grafeno. Los sitios rojos corresponden al contacto por donde se inyectan los electrones al sistema, mientras que los sitios azules refieren a los que se conectan a los contactos drenaje, donde los electrones son colectados y tienen una autoenergía de banda ancha Σ_{WB} . Cada tono de azul corresponde a un contacto drenaje distinto.

Como se puede ver en el esquema de los contactos (figura 2.2), la nanocinta se conecta a tres contactos drenaje: uno al extremo opuesto del contacto de inyección, uno en la parte superior y uno más en la parte inferior. Para calcular las autoenergías de estos contactos drenaje se usa la aproximación de *banda ancha* (WB, *wide-band*),

donde las autoenergías son puramente imaginarias y siguen la expresión

$$\Sigma_{\text{WB}} = -i\eta \sum_{\substack{j \in \text{borde} \\ \text{drenaje}}} |j\rangle \langle j|, \quad (2.31)$$

donde η es el parámetro de acoplamiento de los sitios de la nanocinta con el contacto, y para este caso se considera igual al parámetro de acoplamiento entre átomos de carbono del grafeno. Esta aproximación asume que la DOS de todo el contacto es una constante independiente de la energía (por eso el nombre de banda ancha). Además, el hecho que la autoenergía sea imaginaria tiene el efecto de que los contactos absorben, aunque no perfectamente, imitando de alguna forma que las nanocintas de grafeno son infinitas [49, 50]. Adicionalmente, otra ventaja de usar contactos de banda ancha es que el costo computacional es mucho menor comparado con modelos de cadenas semi-infinitas [46, cap. 3] o cálculos de DFT [51].

Para concluir, la corriente local entre sitios descrita por la expresión (2.27), se mide en unidades naturales de e/h . En los resultados del próximo capítulo, se utiliza la expresión (2.28) para poder mostrar las imágenes del flujo de corriente en los nanosistemas estudiados y se normaliza el valor con el valor máximo de la corriente calculada. También, es de notar que los sistemas con los que se trabaja en esta tesis tienen tamaños entre 780 mil y 1.15 millones de sitios, lo que corresponde a matrices cuadradas de dicha dimensión, lo que representa un costo computacional medianamente importante para los cálculos del transporte electrónico.

Capítulo 3

Grafeno y los Efectos de las Uniones pn

Este capítulo está a dedicado a mostrar como el flujo de corriente de electrones en uniones pn de grafeno puede ser descrito mediante una aproximación de la óptica geométrica, además de como estas uniones revierten el efecto del desorden para configuraciones particulares. El contenido de este capítulo está basado en los resultados publicados en [52], donde el autor de esta tesis es primer autor, y resultados recientes obtenidos en uniones pn rectas de grafeno con desorden o deformaciones elásticas.

Este capítulo se estructura de la siguiente manera. Al inicio, se presenta una descripción de las propiedades electrónicas del grafeno y se da una visión de como se producen las uniones pn en este material. Después, se presenta la propuestas de las trayectorias semiclásicas desde la aproximación de la óptica geométrica en sistemas con gradiente de índice de refracción con su comparación con el flujo de corriente y los resultados emergidos. Al final, se muestra como las uniones pn abruptas en grafeno revierten los efectos de desorden o deformaciones elásticas en el flujo de corriente, cuando se tiene una simetría de reflexión respecto a la interfaz de la unión.

3.1. Grafeno y las uniones pn

El descubrimiento experimental del grafeno en 2004 por Novoselov *et al.* [2] fue un hito en la ciencia de materiales abriendo paso a una intensa actividad científica en el estudio de las sus propiedades (se pueden encontrar casi 270 mil publicaciones hasta ahora al respecto en la base de datos de la *Web of Science*), ya que son superiores a las de otros materiales usuales (véase figura 3.1). Además de que el grafeno es la materia prima de los alótropos de carbono como el fullereno (0D), los nanotubos de carbono (1D) y el grafito (3D) [53], es el primer cristal bidimensional [54] y ha dado apertura a la búsqueda y estudio de materiales 2D como los dicalcogenuros de metales de transición (MoS_2 , WS_2 , WSe_2 , NbSe_2 , NbS_2 , entre otros) o el nitruro de boro hexagonal (hBN) [55, 56]. El grafeno tiene la mayor dureza medida, así como alta conductividad térmica y eléctrica (véase figura 3.1). En esto último supera al silicio, lo que hace pensar que el grafeno puede resolver las dificultades de la electrónica de silicio a dimensiones pequeñas a un bajo costo y con tecnología similar [57, 58].

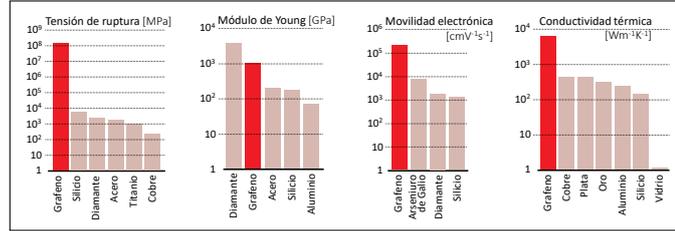


Figura 3.1: Propiedades mecánicas, térmicas y electrónicas del grafeno en comparación con otros materiales. Figura tomada de [59].

Las uniones pn en grafeno han tomado relevancia debido a las posibles aplicaciones en dispositivos nanoelectrónicos. Para generar estas uniones en grafeno se han utilizado métodos físicos y químicos, como el uso de compuertas (por encima y/o por debajo) de voltaje [60–65], el dopaje químico [65–67], una combinación de los dos anteriores [68] o una combinación del uso de compuertas con recocido [69], siendo el primer método el más usual.

Debido al transporte balístico en el grafeno, los electrones se propagan como haces y esto da la posibilidad de observar fenómenos similares a los ópticos. Es por ello que la óptica electrónica en grafeno ha generado un foco de interés en la investigación con diversas contribuciones teóricas [3–21] y experimentales [22–37, 41–43], donde en las últimas siempre se utiliza el uso de compuertas de voltaje para generar las uniones pn . Con esto, se han visto fenómenos de la óptica electrónica en uniones pn de grafeno como la refracción negativa y el tunelamiento de Klein (ausencia de retrodispersión a incidencia normal). El primero, antes visto solamente con la propagación de la luz en metamateriales, es debido a que el potencial externo aplicado a las uniones pn genera en una región un índice de refracción negativo (véase figura 3.5), mientras que el segundo se puede atribuir a la conservación del pseudoespín de los electrones en grafeno. Adicional a estos dos fenómenos, se ha visto que un haz de electrones se puede deflectar mediante deformaciones elásticas que indiquen un fuerte campo pseudomagnético [50, 70–75]. El hecho de que sea posible manipular un haz de electrones en grafeno mediante uniones pn o deformaciones elásticas lleva a que se hagan varias propuestas para dispositivos nanoelectrónicos, como lentes de Veselago [5, 12, 14, 16, 38–40, 42], fibras ópticas de electrones [24, 41], polarizadores de valle [7, 40, 75, 76], colimadores [8], interruptores [25, 77], transistores [10, 18, 35] y microscopios de fermiones de Dirac [20].

La mayor parte de los trabajos en óptica electrónica en uniones pn de grafeno se han realizado con interfaces abruptas [3–10, 12–17, 19, 20], es decir, el potencial electrostático aplicado para generar la unión cambia abruptamente como un perfil de escalón. Además, se ha demostrado recientemente que estas uniones abruptas son posibles experimentalmente [37]. Las uniones con interfaz suave presentan la desventaja de que surge una región energéticamente prohibida y que reduce la transmisión de la corriente. Sin embargo, esta reducción de la transmisión puede tomarse como ventaja

para construir puntos cuánticos con uniones pn circulares suaves. Estas últimas uniones muestran interesantes propiedades como la dispersión de Mie [14] y los modos de galería susurrantes [17, 30, 78], que se han producido experimentalmente [41, 79].

En el trabajo de este capítulo se presenta por un lado el estudio de las uniones pn de grafeno con interfaz suave, que han recibido poca atención, para establecer una conexión con los fenómenos de la óptica de gradiente de índice. Para esto, se estudia el transporte electrónico en uniones pn rectas y circulares, con interfaz abrupta y suave, mediante cálculos numéricos del flujo de corriente con el método de NEGF; estos cálculos se comparan con trayectorias semiclásicas de los electrones obtenidas por aproximaciones de la óptica geométrica. Por otro lado, se estudia cuales son los efectos de las uniones pn con interfaz abrupta en grafeno con regiones localizadas de desorden y con deformaciones elásticas fuera del plano mediante la observación del flujo de corriente.

3.1.1. Propiedades electrónicas del grafeno con modelo de amarre fuerte

Lo siguiente que se expone sobre las propiedades electrónicas del grafeno está basado en lo que presentan Foa Torres *et al.* [80] y Castro Neto *et al.* [70], con la descripción del grafeno mediante el modelo de amarre fuerte.

El grafeno es un material bidimensional compuesto por átomos de carbono que se organiza en una estructura cristalina de *panal de abeja* (ver figura 3.3a). Esta estructura cristalina particular es resultado de la hibridación sp^2 , que consta de tres enlaces covalentes coplanares y un cuarto más débil que es perpendicular a los anteriores. El carbono tiene una configuración electrónica en el estado base $1s^2 2s^2 2p^2$, por lo que el orbital $1s$ se mantiene cerrado y hay cuatro electrones de valencia. Sin embargo, para la formación del grafeno, el carbono maximiza el número de enlaces tomando una configuración electrónica $1s^2 2s^1 2p^3$, es decir, un electrón en el orbital $2s$, $2p_x$, $2p_y$ y $2p_z$. La hibridación de los enlaces σ se produce entre la mezcla de los orbitales $2s$, $2p_x$, $2p_y$, formando una geometría trigonal plana con un ángulo de 120° entre ellos, mientras que en enlace π es el orbital restante $2p_z^1$, como se puede ver en la figura 3.2a. Los enlaces σ son enlaces covalentes intensos que determinan la estabilidad energética, gran flexibilidad y robustez del grafeno. Además, el hecho que las bandas enlazante σ y antienlazante σ^* tienen una gran brecha (~ 12 eV en el punto Γ , donde son más cercanas), como se puede ver en la figura 3.2b, las contribuciones a las propiedades electrónicas de estas bandas se desprecian. De este modo, para el transporte electrónico sólo se considera el orbital π o p_z , donde los orbitales enlazantes π dan lugar a la banda de valencia y los antienlazantes π^* a la banda de conducción; ver figura 3.2b.

¹Las combinaciones específicas de los orbitales en la hibridación sp^2 , así como las energías de hibridación, pueden ser consultadas en [57].

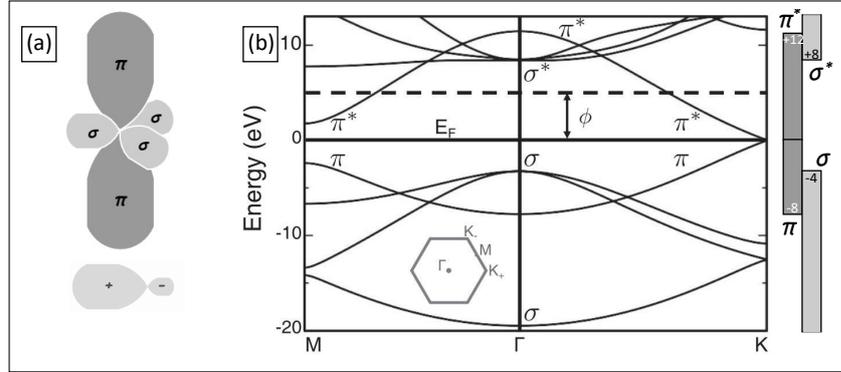


Figura 3.2: (a) Orbitales de la hibridación sp^2 , tres orbitales σ en el plano y un π perpendicular al plano. (b) Estructura de bandas electrónicas para el grafeno, obtenido por cálculos *ab initio*, con la energía de Fermi situada en cero; figura tomada de [80]. A la derecha, los valores de energía que puede tomar la banda. Las bandas enlazante σ y antienlazante σ^* son separadas por una brecha de banda grande, mientras que las bandas π (valencia) y π^* (conducción) se tocan en el punto K^\pm .

La estructura cristalina hexagonal que tiene el grafeno se puede describir como una red triangular de Bravais con dos átomos (A y B) en la celda unitaria y vectores de la base $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2\}$,

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

donde $a_0 \approx 1.42 \text{ \AA}$ es la distancia entre átomos de carbono; en la figura 3.3a las subredes A y B están representadas por sitios amarillos y verdes, respectivamente. De este modo, la primera zona de Brillouin (zB) para el grafeno resulta la región hexagonal de la figura 3.3b², con la base de vectores recíprocos $\{\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2\}$,

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

De las seis esquinas de la zB para el grafeno, sólo dos de estas esquinas son no equivalentes (por la dirección del *pseudoespín de valle*, ver figura 2.4 de [80]), pues el resto se obtiene con sumar un vector recíproco a éstas como se muestra en la figura 3.3b. Estos dos puntos de simetría se denotan como \mathbf{K}^+ y \mathbf{K}^- , y pueden verse escribirse como

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

Para el grafeno prístino³, se tiene que la banda de valencia y conducción se tocan en estos puntos \mathbf{K}^\pm , como se observa en la figura 3.4.

²La zB hexagonales consecuencia de considerar la red triangular de Bravais.

³Puro, sin impurezas ni deformaciones elásticas.

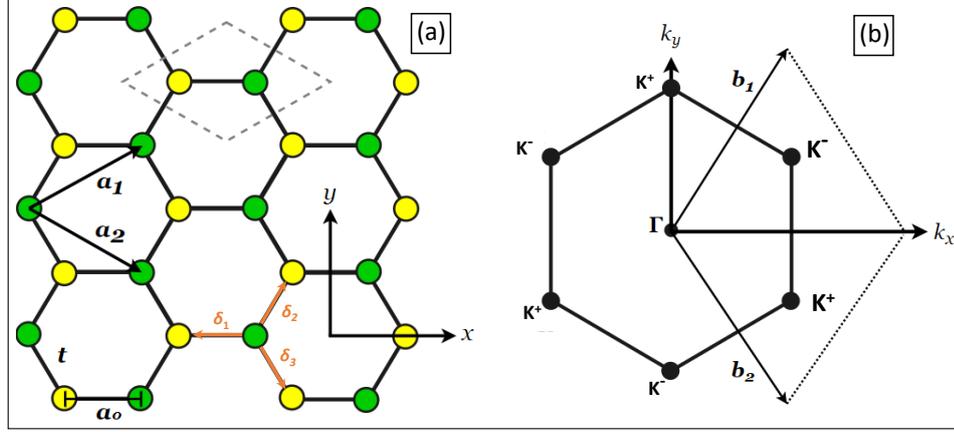


Figura 3.3: (a) Red cristalina del grafeno en el espacio real, que es hexagonal bidimensional y se compone de las dos subredes triangulares A (sitios amarillos) y B (verdes). Se limita con una línea rayada gris la celda unitaria y se muestran los vectores unitarios $\mathbf{a}_{1/2} = a_0/2(3, \pm\sqrt{3})$. El parámetro de red es $a_0 = 1.42 \text{ \AA}$. (b) Primera zona de Brillouin del grafeno, con los vectores de red recíproca $\mathbf{b}_{1/2} = 2\pi/3a_0(1, \pm\sqrt{3})$ y los puntos no equivalentes $\mathbf{K}^\pm = 2\pi/3a_0(1, \mp 1/\sqrt{3})$.

Como se mencionó anteriormente, el transporte electrónico en grafeno se puede estudiar considerando solamente los orbitales p_z ; además, como se puede ver en la figura 3.3a, un átomo de la subred A tiene como primeros vecinos átomos de la subred B y viceversa. Por ello, el Hamiltoniano de amarre fuerte para los electrones considerando sólo primeros vecinos ($\langle \dots \rangle$) se escribe como

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} |i^A\rangle \langle j^B| + \text{H.c.}, \quad (3.4)$$

donde $|i^{A/B}\rangle$ es el estado atómico p_z (normalizado por número de celdas unitarias) localizado en el átomo de carbono de posición \mathbf{r}_i en la subred A/B , y t_{ij} son los parámetros de acoplamiento entre vecinos cercanos, que para el grafeno prístino $t_{ij} = t = 2.8 \text{ eV}$.

Para derivar el espectro energético de bandas con este modelo se usa como *ansatz* una combinación lineal de sumas de Bloch, ya que tiene dos subredes triangulares periódicas, que se puede escribir como

$$|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} (c_A |j^A\rangle + c_B |j^B\rangle), \quad (3.5)$$

donde $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ es un vector de onda que se limita a la zB . Suponiendo además que no hay traslape entre orbitales p_z , $S = \langle p_z^A | p_z^B \rangle = 0$, de la ecuación de Schrödinger se obtiene el siguiente problema de eigenvalores:

$$\begin{pmatrix} H_{AA}(\mathbf{k}) & H_{AB}(\mathbf{k}) \\ H_{BA}(\mathbf{k}) & H_{BB}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix} = E(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

donde $H_{\alpha\beta} = \sum_{i,j} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)} \langle i^\alpha | H | j^\beta \rangle$, por lo que se obtiene que $H_{BA} = H_{AB}^*$ y $H_{AA} = H_{BB} = 0$. Así, el elemento H_{AB} se escribe como

$$\begin{aligned} H_{AB}(\mathbf{k}) &= -t \left(e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_3} \right) \\ &= -te^{-ik_x a_0} \left[1 + 2e^{3ik_x a_0/2} \cos\left(\sqrt{3}k_y a_0/2\right) \right], \end{aligned} \quad (3.7)$$

donde los vectores a primeros vecinos en la red real se muestran en la figura 3.3a y están dados como $\boldsymbol{\delta}_1 = -1/3(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) = -a_0(1, 0)$, $\boldsymbol{\delta}_2 = 1/3(2\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) = a_0/2(1, \sqrt{3})$ y $\boldsymbol{\delta}_3 = 1/3(2\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) = a_0/2(1, -\sqrt{3})$.

De (3.6) y (3.7) se obtiene que la energía tiene la forma $E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm |H_{AB}(\mathbf{k})|$,

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

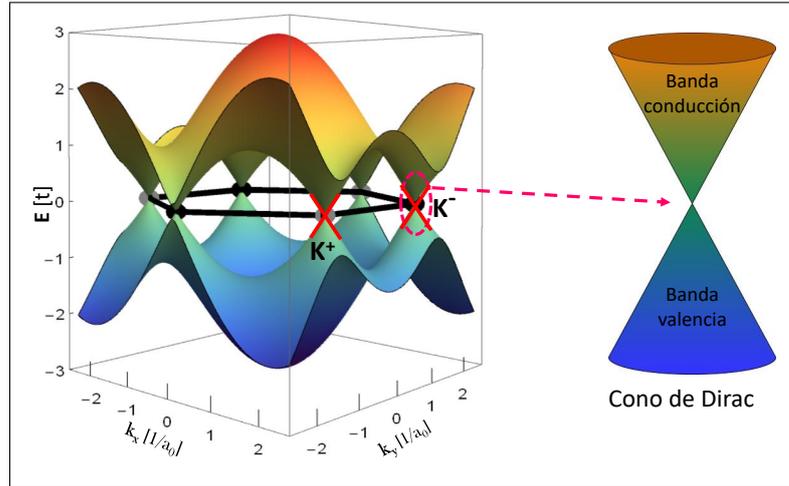


Figura 3.4: (a) Estructura de bandas del grafeno prístino. Se muestra que en las seis esquinas de la zona de Brillouin (puntos grises \mathbf{K}^+ , puntos negros \mathbf{K}^-) las bandas de valencia y conducción se tocan, y cerca de estos puntos la relación de dispersión puede aproximarse de forma lineal (líneas rojas), formando los conos de Dirac.

Dado que los orbitales p_z sólo los ocupa un electrón, en el modelo π - π^* sólo está llena la banda inferior (π). En la expresión obtenida para la energía, el signo negativo corresponde a la banda de valencia (π) y el signo positivo a la banda de conducción (π^*). De aquí mismo se verifica que $E(\mathbf{k} = \mathbf{K}^{\pm}) = 0$, siendo los puntos \mathbf{K}^{\pm} donde las bandas se tocan, es decir, no hay brecha de banda. En la figura 3.4 se grafica esta relación de dispersión en la zB.

En la estructura de bandas del grafeno con este modelo (figura 3.4) se observa como es que cerca de los puntos \mathbf{K}^{\pm} la relación de dispersión se aproxima de forma lineal, donde se puede hacer una descripción de Dirac de lo electrones, dando lugar a los llamados *Conos de Dirac*, de modo que el nivel de Fermi se encuentra justo donde

los conos se tocan. Es por ello que a estos puntos se les llama *puntos de Dirac*⁴. Para obtener dicha relación de dispersión lineal, basta con expandir la energía (3.8) alrededor de los puntos \mathbf{K}^\pm , de modo que se considere $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{K}^\pm \ll 1$, llegando así a la expresión

$$E(\mathbf{q}) = s\hbar v_F |\mathbf{q}|, \quad (3.9)$$

donde $s = \text{sgn}(E) = \pm 1$ es el índice de banda ($s = -1$ para banda de valencia, $s = +1$ para banda de conducción) y $v_F = 3a_0t/2\hbar \approx 10^6$ m/s es la velocidad de Fermi. Esta aproximación de bajas energías hace una descripción continua de fermiones de Dirac relativistas sin masa⁵, que es uno de los aspectos más interesantes del grafeno, donde v_F es la velocidad efectiva a la que los electrones se mueven [83]. Para obtener el Hamiltoniano de la descripción de Dirac, se hace la expansión del Hamiltoniano (3.7) alrededor de los puntos \mathbf{K}^\pm , $\mathbf{q} \ll 1$, llegando a la expresión

$$H_{\text{Di}}^\pm(\mathbf{q}) = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & q_x \mp iq_y \\ q_x \pm iq_y & 0 \end{pmatrix} = \hbar v_F \hat{\sigma}_\pm \cdot \mathbf{q}, \quad (3.10)$$

donde H_{Di}^\pm corresponde al punto \mathbf{K}^\pm , y $\hat{\sigma}_+ = \hat{\sigma}_-^* = (\sigma_x, \sigma_y)$ con $\sigma_{x/y}$ matrices de Pauli. Aquí es donde se puede ver que los puntos \mathbf{K}^+ y \mathbf{K}^- son no equivalentes, dando lugar a un grado de libertad referente a la polarización de valle (valle \mathbf{K}^+ o \mathbf{K}^-) llamado *pseudospín de valle*. Este pseudospín de valle da lugar a un nuevo tipo de electrónica en grafeno llamada *valletrónica* [84], aunque este grado de libertad no se considera para las uniones pn ya que no afecta.

Del Hamiltoniano (3.10), se obtiene que los eigenestados de Dirac son

$$|\Psi_{\xi,s}(\mathbf{q})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\xi\theta_{\mathbf{q}}} \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

donde s es el índice de banda, ξ es el índice de valle ($\xi = +1$ para el valle \mathbf{K}^+ , $\xi = -1$ para el valle \mathbf{K}^-), $\theta_{\mathbf{q}} = \arg(q_x + iq_y)$ es la fase entre las subredes, que juega el papel de *pseudospín de red*⁶. De este modo, considerando la polarización de valle, los eigenestados se pueden escribir como

$$\Psi_j(\mathbf{q}) = \begin{cases} c^- e^{i(\mathbf{q} + \mathbf{K}^-) \cdot \mathbf{r}_j} + c^+ e^{i(\mathbf{q} + \mathbf{K}^+) \cdot \mathbf{r}_j} & \text{si } j \in \text{A}, \\ s c^- e^{i(\mathbf{q} + \mathbf{K}^-) \cdot \mathbf{r}_j + i\theta_{\mathbf{q}}} - s c^+ e^{i(\mathbf{q} + \mathbf{K}^+) \cdot \mathbf{r}_j - i\theta_{\mathbf{q}}} & \text{si } j \in \text{B}, \end{cases} \quad (3.12)$$

donde el parámetro c^\pm controla la ocupación de los valles \mathbf{K}^\pm . Para los resultados de este trabajo, se considera que la polarización de valle de los electrones inyectados es la misma, de modo que $c^\pm = 1/2$.

⁴Los puntos de Dirac son aquellos puntos donde la relación de dispersión es lineal alrededor de ellos. Los valles \mathbf{K}^\pm no siempre coinciden con los puntos de Dirac, pues cuando hay deformaciones elásticas en grafeno dichos puntos son distintos [50, 81, 82].

⁵Si bien la velocidad a la que se mueven los electrones en el grafeno es apenas una centésima parte de la velocidad de la luz, se considera que los electrones son fermiones “relativistas” sin masa por el hecho de que se describen como partículas relativistas. Lo anterior debido a que la energía relativista de una partícula es $E = (m^2c^4 + |\mathbf{p}|^2c^2)^{1/2}$, y despreciando la masa, se llega a la expresión $E = c|\mathbf{p}|$, que es la relación de dispersión que tienen los electrones en grafeno considerando su “velocidad de la luz” c como la velocidad de Fermi v_F , es decir, $E = v_F|\mathbf{p}|$ como lo muestra la ecuación (3.9).

⁶Ya que en el eigenestado de Dirac cada entrada del bispinor corresponde a la amplitud de la subred A y subred B, respectivamente.

La aproximación de Dirac funciona bien para energía en el rango $[-0.15t, 0.15t]$, que es el rango de energías efectivas que se utilizan en los resultados de este trabajo. A energías más altas, los conos de Dirac sufren la deformación de pasar de conos circulares a conos trigonales, llamado *trigonal warping effects* [85, 86].

3.1.2. Descripción de las uniones pn en grafeno

Las uniones pn en grafeno están formadas por dos regiones con diferente dopaje, como se muestra en las figuras 3.5a-b, y comúnmente son creadas por medio de compuertas metálicas o gráficas (figura 3.5c-d) que inducen un potencial electrostático externo. El perfil de este potencial electrostático, expresado $V(\mathbf{r})$ en el espacio continuo y $V = \sum_j V_j |j\rangle \langle j|$ en el método de amarre fuerte [57, 87], es el que da la configuración de la unión en la nanocinta de grafeno.

Como se mencionó antes, el nivel de Fermi para el grafeno sin potencial electrostático aplicado se encuentra en el punto de Dirac (figura 3.4). En grafeno, una región tipo n se genera aplicando un potencial electrostático negativo (considerando $E_F = 0$), de modo que el nivel de Fermi se mueva hacia la banda de conducción, mientras que una región tipo p se produce con un potencial positivo causando que el nivel de Fermi se vaya a la banda de valencia; véase figura 3.5a. Este desplazamiento de los conos de Dirac es consecuencia de considerar el Hamiltoniano completo del sistema ahora como [13, 15]

$$H = H_{\text{Di}}(\mathbf{q}) + V(\mathbf{r})\mathbb{1}, \quad (3.13)$$

donde H_{Di} es el Hamiltoniano (3.10) para cualquier valle.

Una unión pn es generada si hay una transición interbanda, es decir, los electrones van de una banda a otra (por ejemplo, de la banda de conducción a valencia en la figura 3.5a), pero también hay uniones pp' o nn' donde la transición es intrabanda, y se mantiene en una misma banda; para estas últimas uniones, basta con que el valor del potencial aplicado en dos regiones sea distinto, pero que el nivel de Fermi se mantenga en la misma banda de valencia (pp') o de conducción (nn').

En los últimos años se han realizado experimentos en uniones pn rectas de grafeno con el método de compuertas de potencial [22–28, 31, 33, 35, 36], como se muestra en la figura 3.5a, y se ha demostrado que se pueden hacer uniones abruptas a nivel atómico [37]. Para ilustrar, se toma como ejemplo el dispositivo usado por Chen *et al.* [31] (figura 3.5c), donde se generan uniones pn , pp' y nn' con interfaz suave. En este dispositivo, se encapsula grafeno con nitrato de boro hexagonal (BN) y se utiliza una compuerta de grafito en una región del dispositivo, para que junto con la compuerta de silicio dopado se puedan generar los tres tipos de uniones, aplicando voltajes específicos. También, se utilizan sólo compuertas metálicas por encima (*top gates*) [24, 28, 33] para generar dos regiones de dopaje. Estas uniones pn rectas son generadas aplicando el potencial electrostático:

$$V_{\text{lin}}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq -w/2 \\ (\frac{x}{w} + \frac{1}{2}) V & \text{si } |x| < w/2 \\ V & \text{si } x \geq w/2, \end{cases} \quad (3.14)$$

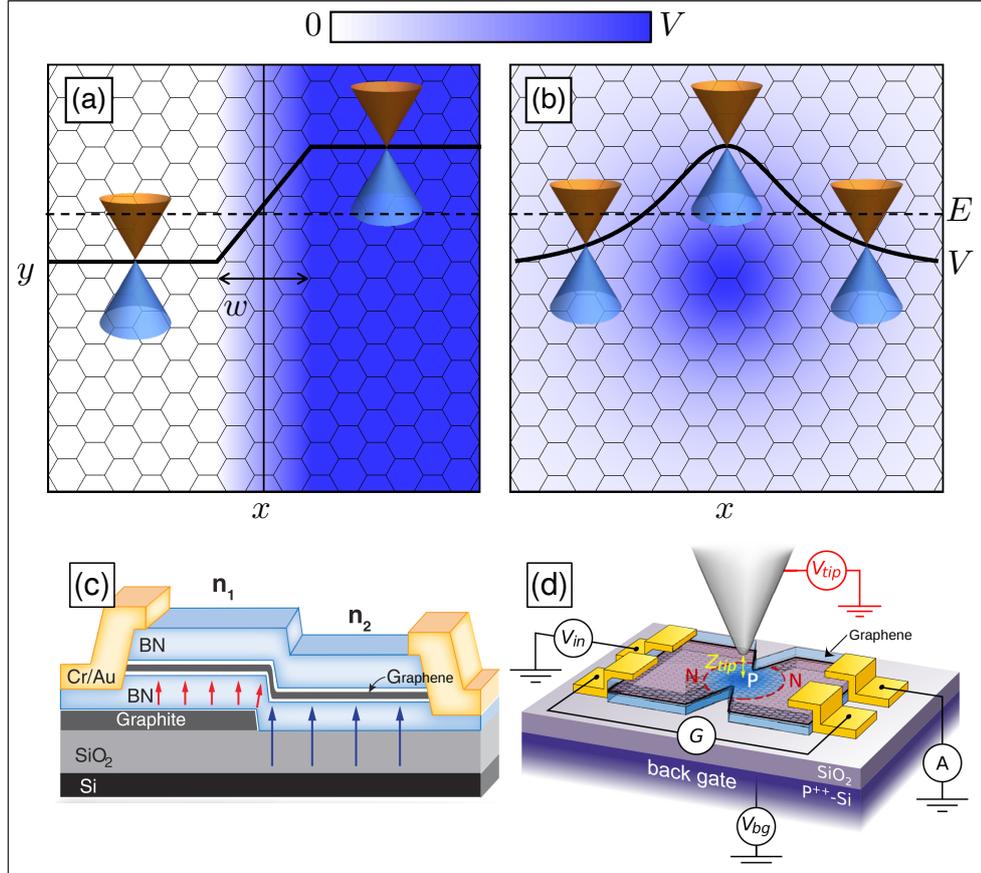


Figura 3.5: Unión pn de grafeno recta (a) y circular (b). El sombreado azulado muestra el potencial electrostático dentro de la nanocinta de grafeno (ver escala arriba). Ambas uniones tienen una interfaz suave que separa la región tipo n (izquierda, blanco) y la tipo p (derecha, azul), como lo indica el perfil del potencial electrostático señalado la curva sólida negra. Para la unión recta, se denomina *región de interfaz* donde el potencial cambia linealmente, y tiene un tamaño w . Se observa el desplazamiento de los conos de Dirac por el potencial electrostático aplicado, causando que los electrones con energía E (línea negra rayada) vayan de la banda de conducción (cono naranja) a la banda de valencia (cono azul claro). Esquemas experimentales propuestos para generar uniones pn rectas (c) y circulares (d), por Chen *et al.* [31] y Brun *et al.* [43], respectivamente. Para la unión recta, se utiliza una compuerta de grafito, que junto con la compuerta de silicio, permite generar las uniones pn (incluso pp' y nn'). Para la unión circular, se utiliza el SGM como compuerta para generar el perfil de potencial de dopaje.

donde V es el valor del potencial que tiene la región p y w es el ancho de la llamada región de interfaz, donde el potencial electrostático cambia de forma lineal entre las regiones n y p (véase figura 3.5a).

Por el lado de las uniones pn circulares, se han realizado estudios experimentales con interfaz suave [30, 41–43], como se muestra el perfil de la figura 3.5b. Para mostrar como se generan las uniones circulares, se toma el arreglo de Brun *et al.* [43] (figura 3.5d) con que generan uniones pn (pero también se podrían generar uniones pp' y nn' con este mismo método). Este arreglo experimental consta de grafeno encapsulado sobre sustratos de silicio y como compuerta de voltaje utilizan un *Scanning Gate Microscopy* (SGM), que consta de una punta metálica polarizada de microscopio (STM o AFM) que puede barrer sobre el dispositivo anterior y genera un potencial electrostático local por debajo de la punta. Con el SGM se tiene la posibilidad de controlar el ancho de la unión pn para cualquiera que sea su altura. El potencial inducido por el SGM está modelado por la expresión [42, 43]

$$V_{\text{cir}}(\mathbf{r}) = \frac{V}{1 + (r/r_0)^\alpha}, \quad (3.15)$$

donde V y r_0 son la altura y el radio del potencial, respectivamente, y α controla la suavidad de la unión. De la figura 3.5b se puede notar que la unión pn circular puede entenderse como una unión npn .

3.2. Trayectorias electrónicas desde la óptica geométrica de gradiente de índice

El camino libre medio en el grafeno suspendido puede llegar a alcanzar $1 \mu\text{m}^7$ [70, 90], por lo que la propagación de haces de electrones en este material puede describirse como fenómenos ópticos. De esto, se ha visto que un haz de electrones en la interfaz de una unión pn en grafeno tiene un comportamiento como la luz cuando pasa entre entre dos materiales de diferente índice de refracción. Así, los electrones cuando se reflejan y transmiten siguen la una versión generalizada de la ley de reflexión y refracción de la óptica geométrica, donde el índice de refracción está determinado por el dopaje de las regiones n y p , una característica importante de las uniones [3, 5, 9, 28, 31].

Para hacer la descripción de la propagación de haces de electrones como la propagación de partículas puntuales, se hace una aproximación de la teoría semiclásica para el Hamiltoniano (3.13), donde esta dinámica de los electrones es reformulada mediante el Hamiltoniano pseudorelativista clásico

$$H_{\text{sc}} = s(\mathbf{r})v_F |\mathbf{p}| + V(\mathbf{r}), \quad (3.16)$$

⁷Para comparar, el camino libre medio del Silicio, el material más usado en la electrónica actual, y del Germanio están del orden de $10^{-2} \mu\text{m}$ [88, 89].

donde $s(\mathbf{r}) = \text{sgn}(E - V(\mathbf{r}))$ es el índice de banda y $|\mathbf{p}| = \sqrt{p_x^2 + p_y^2} = \sqrt{p_r^2 + l^2/r^2}$ es el momento lineal en coordenadas cartesianas y polares (l el momento angular), respectivamente. Las trayectorias de los electrones balísticos descritas por este Hamiltoniano pueden ser relacionadas con la óptica de rayos definiendo el índice de refracción del medio (artificial) como

$$\mathbf{n}(\mathbf{r}) = \frac{E - V(\mathbf{r})}{v_F}. \quad (3.17)$$

Tomando en cuenta que el potencial electrostático $V(\mathbf{r})$ puede tener cambios suaves (en la escala de la longitud de onda de Fermi de los electrones) por el sistema, se obtiene una descripción de un medio con gradiente de índice.

Esta definición (3.17) del índice de refracción efectivo del medio está motivada por la generalización de la Ley de Reflexión y la Ley de Snell (*Ley de Snell generalizada*)⁸

$$\theta_{\text{re}} = -\theta_{\text{in}}, \quad \frac{\sin(\theta_{\text{in}})}{\sin(\theta_{\text{tr}})} = \frac{E - V}{E} = \frac{\mathbf{n}_{\text{tr}}}{\mathbf{n}_{\text{in}}}, \quad (3.18)$$

donde $\theta_{\text{in/re/tr}}$ es el ángulo de incidencia, reflexión y transmisión, y $\mathbf{n}_{\text{in/tr}}$ el índice de refracción de la región n y p , respectivamente, de una unión pn recta abrupta ($w \rightarrow 0$) como las de la figura 3.7. Además, de esta generalización de la Ley de Snell, dado que $\mathbf{n}_{\text{tr}} < 0$, se obtiene el fenómeno de *refracción negativa* en el grafeno [5, 13, 28].

Las ecuaciones de movimiento para los electrones (como partículas puntuales) en las uniones rectas en esta descripción semiclásica están dadas por

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \partial_{p_x} H_{\text{sc}} = \frac{s(x) v_F p_x}{\sqrt{p_x^2 + p_y^2}} = \frac{v_F p_x}{\mathbf{n}(x)}, \\ \frac{dy}{dt} &= \partial_{p_y} H_{\text{sc}} = \frac{s(x) v_F p_y}{\sqrt{p_x^2 + p_y^2}} = \frac{v_F p_y}{\mathbf{n}(x)}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

donde además se obtiene que p_y se conserva; esto por la simetría traslacional a lo largo del eje y (ver figura 3.5a). Eliminando la dependencia temporal de estas ecuaciones, $dy/dx = p_y/p_x = s(x)p_y/\sqrt{\mathbf{n}^2(x) - p_y^2}$, se obtienen las trayectorias semiclásicas

$$y(x) = y_0 + p_y \int_{x_0}^x \frac{s(x') dx'}{\sqrt{\mathbf{n}^2(x') - p_y^2}}, \quad (3.20)$$

donde $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0)$ es la posición inicial del electrón en el sistema.

Para el caso de las uniones circulares, las ecuaciones de movimiento de los electrones

⁸La obtención de esta Ley de Snell generalizada se hace a partir de la conservación del momento paralelo a la interfaz entre dos medios con distinto índice de refracción; para más detalles véase la tesis previa del autor [91, sec. 3.2.3]. En este sentido, esta Ley de Snell generalizada se cumple para cada región del sistema con distinto índice de refracción.

son dadas por

$$\begin{aligned}\frac{dr}{dt} &= \partial_{p_r} H_{\text{sc}} = \frac{s(r) v_F p_r}{\sqrt{p_r^2 + \frac{l^2}{r^2}}} = \frac{v_F p_r}{n(r)}, \\ \frac{d\theta}{dt} &= \partial_l H_{\text{sc}} = \frac{s(r) v_F l}{r^2 \sqrt{p_r^2 + \frac{l^2}{r^2}}} = \frac{v_F l}{r^2 n(r)},\end{aligned}\tag{3.21}$$

de donde l se conserva por la simetría rotacional (ver figura 3.5b). Nuevamente, eliminando la dependencia temporal de estas ecuaciones se llega a las trayectorias semiclásicas

$$\theta(r) = \theta_0 + l \int_{r_0}^r \frac{s(r') dr'}{r' \sqrt{r'^2 n^2(r') - l^2}},\tag{3.22}$$

con posición inicial $\mathbf{r}_0 = (r_0, \theta_0)$. Estas trayectorias semiclásicas obtenidas para los electrones son idénticas a las trayectorias obtenidas para haces de luz en medios con gradiente de índice [92], aparte de una diferencia importante: el índice de refracción $n(\mathbf{r})$ depende de la energía y potencial de dopaje, y puede tomar también valores negativos en la región p . Este hecho da lugar al fenómeno de la refracción negativa en el grafeno, pues se pasa de un índice de refracción positivo (región n) a un índice de refracción negativo, como se ve en las figuras 3.7b-d y 3.11a-b. También, n es siempre negativo en las uniones pp' y siempre positivo en las uniones nn' .

Además del fenómeno de refracción negativa para las uniones pn , resulta la existencia de regiones energéticamente prohibidas. Esto surge debido a que las raíces del denominador de las ecuaciones (3.20) y (3.22) se convierten en imaginarias para ciertas regiones del sistema, donde se cumplen las condiciones $|n(x)| \leq |p_y|$ y $|n(r)| \leq |l/r|$ para las uniones rectas y circulares, respectivamente. Estas regiones prohibidas son mostradas en la figura 3.6, donde al considerar los denominadores antes mencionados, la curva degradada del índice de refracción n cae dentro de la región gris sombreada, que está delimitada por el valor del momento lineal p_y (o angular l) que tiene el electrón. De aquí se ve que el tamaño de dicha región prohibida depende del valor de p_y (o l) del electrón; además, cuando la interfaz es abrupta, no hay región prohibida porque no hay variación de n que caiga dentro de la región sombreada. Estas regiones prohibidas no pueden ser penetradas desde el punto de vista de la mecánica clásica (viendo a los electrones como partículas puntuales), pero desde la mecánica cuántica los electrones pueden tunelar estas regiones prohibidas como ondas evanescentes.

Como se verá en los resultados de las próximas secciones, el tunelamiento de los electrones a través de la región prohibida es suprimido en gran medida para las uniones pn suaves, lo que hace que los bordes de esta región tomen el rol de zonas de reflexión del haz incidente. Esto se explica con la figura 3.6, donde la transmisión del haz de electrones decae conforme la incidencia de los electrones es más oblicua, ya que p_y (o l) incrementa haciendo también que el tamaño de la región prohibida aumente. De la misma forma, la transmisión de un haz con incidencia normal es perfecta, ya que

$p_y = 0$ (o $l = 0$) y la región prohibida desaparece, lo que acuerda con la conservación del pseudoespín de subred que da lugar a la ausencia de retrodispersión o al llamado *tunelamiento de Klein*.

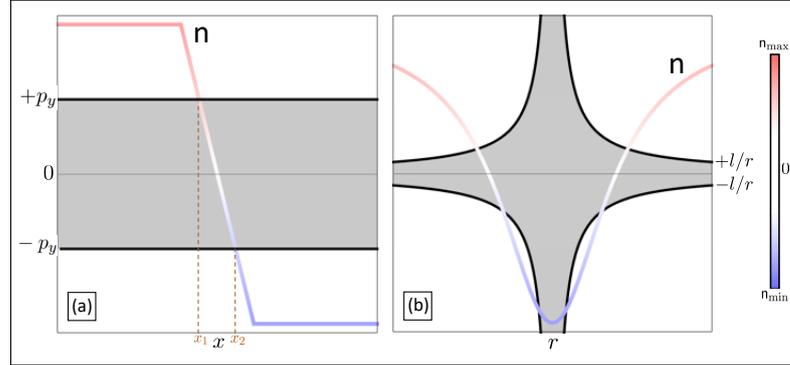


Figura 3.6: Zonas prohibidas para las uniones pn rectas **(a)** y circulares **(b)**. La curva degradada de rojo a azul da el valor de índice de refracción n (ver leyenda lateral para n) a una energía constante, y las curvas negras representan el momento lineal p_y y angular l . Cuando n cae dentro de las regiones grises sombreadas, las raíces de (3.20) y (3.22) son imaginarias y los electrones tienen que hacer tunelamiento cuántico a través de dichas regiones prohibidas. Las líneas cafés en (a) indican el tamaño de la región prohibida en el espacio real.

El buen acuerdo entre el flujo de corriente cuántico, calculado por NEGF, y las trayectorias semiclásicas de la óptica geométrica puede ser esperado sólo en el siguiente régimen de parámetros específicos. Es necesario que la longitud de onda de Fermi de los electrones λ_F sea mucho mayor que la distancia interatómica de la red de grafeno a_0 , para que éstos se puedan describir como un continuo, además de que λ_F tiene que ser mucho menor que el tamaño del sistema (L_x, L_y) , para percibir el trayecto de los electrones por el sistema. También, es necesario que el cambio suave del potencial electrostático pueda ser percibido por los electrones con longitud de onda λ_F para que notar los efectos de la suavidad de la unión, de modo que ésta debe ser más pequeña que la variación espacial del potencial $\Delta_{x/y}V$. Estas condiciones pueden resumirse por la desigualdad

$$a_0 \ll \lambda_F = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|} = \frac{3\pi}{|E_{\text{ef}}|} a_0 t < \Delta_{x/y} \ll L_{x/y}. \quad (3.23)$$

Sin embargo, el hecho que el potencial electrostático cambie suavemente por el sistema, hace que la energía efectiva del electrón sea $E - V(\mathbf{r})$, de modo que su longitud de onda de Fermi cambiará hasta violar esta desigualdad.

En las siguientes subsecciones se mostrará la comparación entre el flujo de corriente y las trayectorias semiclásicas para el caso de las uniones rectas y circulares, donde se consideran los casos con interfaz suave y abrupta.

3.2.1. Uniones pn rectas

Para comenzar a analizar el efecto de las uniones pn en grafeno, primero se analiza el caso de las uniones con interfaz abrupta, es decir, el perfil del potencial electrostático tiene forma de escalón (en otras palabras, $w \rightarrow 0$ en la figura 3.5a). Para ello, se analiza el flujo de corriente, calculado a partir del método NEGF, sobre una cinta de grafeno con un tamaño de 150×150 nm o más grande⁹. En la figura 3.7a se muestra el flujo de corriente de un haz de electrones inyectado de acuerdo a la ecuación (2.29) en el borde izquierdo de la nanocinta de grafeno prístino, con una energía $E = 0.15t = 420$ meV (que corresponde a una longitud de onda de Fermi $\lambda_F \approx 9$ nm) y un momento lineal paralelo al eje x (es decir $\mathbf{k}_0 = k_F(1, 0)$). Como se observa en la figura, la propagación de los electrones como haz tiene una divergencia debido a la difracción (por su naturaleza ondulatoria), lo que permitirá comparar el flujo de corriente calculado numéricamente con las trayectorias semiclásicas.

En la figura 3.7b se muestra el mismo caso, pero ahora con una unión pn recta con interfaz abrupta (línea gris rayada) donde el potencial electrostático aplicado cambia de 0 a $2E$ (ver ecuación (3.14))¹⁰. Se observa que por la presencia de la unión, el haz de electrones sufre refracción negativa al pasar de la región n a la región p , enfocándose nuevamente en el borde derecho de la nanocinta. Además, ocurre el tunelamiento de Klein por la incidencia normal del haz en la interfaz. El fenómeno de refracción negativa se visibiliza aquí fuertemente, ya que de acuerdo a (3.17) el índice de refracción de cada región tiene el mismo valor, $|n_{in}| = |n_{tr}|$, y con la refracción común de la luz entre dos medios con el mismo índice de refracción no habría cambio de trayectoria de los rayos, pero en este caso los signos tienen diferente signo por lo que los electrones sufren cambio en su trayectoria.

Por otro lado, cuando la interfaz se inclina¹¹ con un ángulo θ_{in} los electrones no llegan a la interfaz de forma ortogonal, y el haz de electrones incidente se divide en un haz reflejado y un haz transmitido. Las líneas sólidas negras, verdes y azules de la figura 3.7 corresponden a las trayectorias semiclásicas predichas (ecuación (3.20)) para los haces de electrones incidente, reflejado y transmitido, respectivamente. Nótese que cada trayectoria tiene un $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0)$ distinto. Estas trayectorias siguen la Ley de Snell generalizada (3.18); además, la opacidad de las trayectorias semiclásicas transmitidas y reflejadas está relacionada con los eficientes de transmisión

$$T = \frac{\cos \theta_{in} \cos \theta_{tr}}{\cos^2 \left(\frac{\theta_{in} + \theta_{tr}}{2} \right)}, \quad (3.24)$$

y reflexión $R = 1 - T$, que son similares a los coeficientes expresados en la óptica para

⁹La precisión de las aproximaciones utilizadas aquí incrementa con el tamaño del sistema, por la condición (3.23).

¹⁰Como el haz de electrones se inyectó en el borde izquierdo, éste comenzó en la región n de la unión, como será en todos los casos posteriores correspondientes.

¹¹Note que por la isotropía de los conos de Dirac (estructura de bandas a bajas energías), inclinar la unión un ángulo θ es equivalente a inyectar los electrones a dicho ángulo θ . Ver apéndice A de [91].

la luz entre dos medios con distinto índice de refracción.

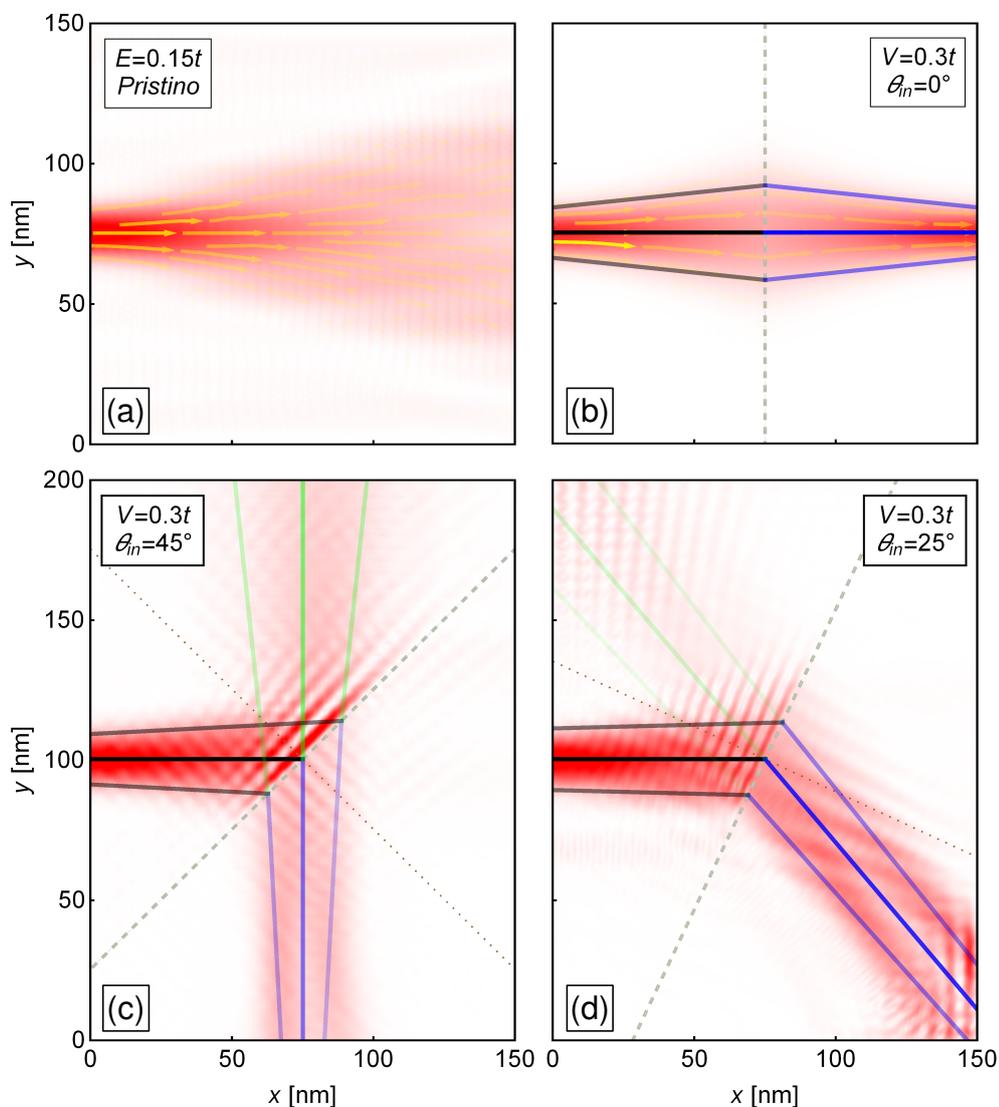


Figura 3.7: Flujo de corriente en nanocintas de grafeno en ausencia (a) y presencia [(b)-(d)] de un potencial electrostático que cambia de forma abrupta en la línea rayada gris y por tanto genera una unión pn . La densidad de corriente es indicada por el degradado de rojo (máximo) a blanco (mínimo) y los vectores del campo de corriente por flechas amarillas. El haz electrónico divergente de (a) es enfocado por la unión pn en (b). Se observa en (b)-(d) que las trayectorias semiclásicas de la ecuación (3.20) concuerdan con el flujo de corriente calculado a partir del método NEGF. En la interfaz de la unión pn , el haz electrónico incidente se divide en un haz reflejado y en un haz transmitido, en acuerdo con la ley de Snell generalizada (3.18), y que es evidenciado por las trayectorias semiclásicas.

En general, las trayectorias semiclásicas concuerdan en buena forma con los cálculos cuánticos numéricos, como se ve en las figuras 3.7b-d. Este tipo de uniones pn abruptas se han estudiado en gran medida teóricamente [3, 5, 7, 9, 10, 13, 19, 20] y con una interfaz estrecha experimentalmente [23–25, 28, 31, 33, 35, 36]. La contribución de este trabajo es confirmar la Ley de Snell generalizada por medio de cálculos cuánticos numéricos del flujo de corriente. Adicional a esto, en las figuras 3.7c-d se observan patrones ondulatorios cerca de la interfaz de la unión, que es ampliado en la figura 3.8a. En la figura 3.8b se muestra la superposición entre una onda incidente y una onda reflejada en la interfaz, $|e^{ik_{in}\cdot r} + e^{ik_{re}\cdot r}|^2$. El acuerdo entre estas dos últimas figuras confirma que el patrón ondulatorio cerca de la interfaz es efecto de la interferencia entre las funciones de onda del haz de electrones incidente y del reflejado, que va más allá de las trayectorias semiclásicas, pues dichas trayectorias sólo describen la óptica de rayos. También, patrones ondulatorios similares se pueden observar cerca de los bordes de la nanocinta, y se explican de manera similar por las reflexiones de los bordes. Las reflexiones por los bordes están dadas porque el potencial complejo asociado a los contactos no absorben de forma perfecta y por tanto generan estas pequeñas reflexiones que interfieren con el haz incidente. Además, en la figura 3.8a líneas de flujo (flechas amarillas) muestran que la corriente no cambia instantáneamente su dirección en la interfaz de la unión, sino que el cambio es en la región del ancho finito del haz incidente, lo que tampoco cubre las trayectorias semiclásicas, pues nuevamente el ancho de éstas últimas es infinitesimal.

Los resultados de las figuras 3.7 y 3.8 ya han sido reportados en la tesis de licenciatura [91] anterior del autor de la presente y han sido tomados como punto de partida para los resultados que se presentan a continuación.

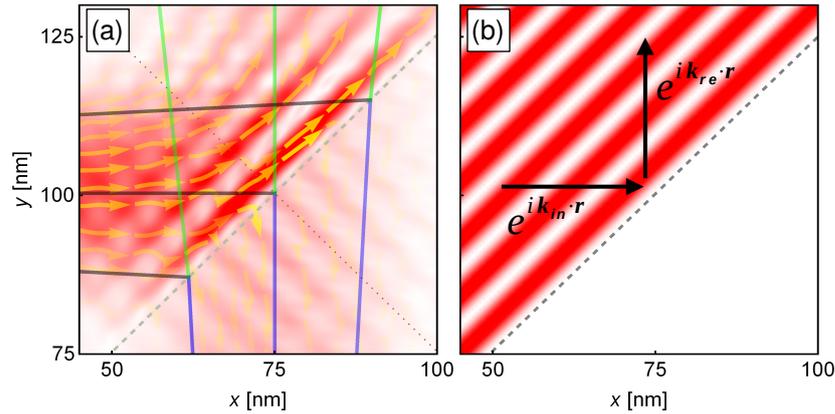


Figura 3.8: Flujo de corriente cerca de la interfaz de la unión pn en grafeno. **(a)** acercamiento de la región de la interfaz de la figura 3.7c. **(b)** Densidad de probabilidad generada por la superposición de un haz electrónico incidente y uno reflejado, $|e^{ik_{in}\cdot r} + e^{ik_{re}\cdot r}|^2$. El buen acuerdo entre (a) y (b) muestra que la interferencia entre dos haces electrónicos genera el patrón ondulatorio cerca de la interfaz (línea rayada gris).

Para continuar con la discusión de las uniones pn rectas, ahora se presentan las uniones con interfaz suave, donde en la región de interfaz de tamaño de $w \approx 350a_0 \approx 50 \text{ nm} \approx 5\lambda_{F,\text{iny}}$ el potencial electrostático aplicado cambia linealmente, como en la figura 3.5a. Como lo muestra la figura 3.9, el acuerdo entre las trayectorias semiclásicas y los cálculos del flujo de corriente acuerdan de buena manera, además de que la Ley de Snell generalizada mantiene su validez en las uniones suaves¹². Es de notar que en comparación con el caso de la interfaz abrupta (figura 3.7), el haz de electrones incidente es reflejado en gran parte con la interfaz suave. Este efecto de reflexión puede observarse incluso cuando la incidencia es normal (figura 3.9a), debido a que el haz de electrones inyectado sufre difracción y se cambia ligeramente el ángulo incidente de los electrones en los bordes del haz y sólo para los electrones cerca de incidencia normal el tunelamiento de Klein toma lugar. Además, este efecto es incluso más pronunciado para haces de electrones muy angostos (simulando fuentes puntuales) donde la difracción es más intensa, como se observa en la figura 3.9b. Las uniones pn suaves de las figuras 3.9a-b pueden ser usadas para generar haces electrones estrechos paralelos después de la región de interfaz, como lo muestra el flujo de corriente.

El incremento de la reflexión del haz inyectado para estas uniones suaves puede ser entendido por el surgimiento de la región prohibida que es indicada por una región gris sombreada en la figura 3.9. Además, se puede ver una acumulación de la densidad de corriente justo en el borde la región prohibida, lo que coincide con el punto de retorno de la trayectoria semiclásica. Como se anticipó en la figura 3.6a, el tamaño de la región prohibida está determinado por el momento p_y que tenga el electrón, pero debido a la difracción del haz inyectado, no todos los electrones del haz tienen el mismo ángulo de incidencia θ (pero si es alrededor de θ_{in} para el caso de un haz ancho) y entonces no todos tienen el mismo momento p_y ; es decir, $p_y = p_y(\theta)$ y por tanto el tamaño de la región prohibida depende de este ángulo θ . Es por ello que en cada panel de la figura 3.9 la región prohibida tiene una forma distinta. La difracción del haz en cada figura fue determinado a partir del flujo de corriente en grafeno homogéneo (figura 3.7a) y es cubierta por las trayectorias semiclásicas, como se observa en la figura 3.9. Adicionalmente, la opacidad de las trayectorias semiclásicas está relacionada con el coeficiente de transmisión T_{lin} que es determinado por la probabilidad de tunelamiento de la región prohibida y sigue la expresión

$$T_{\text{lin}}(\theta) = \left| e^{i \int_{x_1}^{x_2} dx' p_x(x')} \right|^2 = e^{-2 \int_{x_1}^{x_2} dx' \sqrt{n^2(x') - p_y^2(\theta)}}, \quad (3.25)$$

donde x_1 y x_2 limitan el tamaño de la región prohibida para el valor $p_y(\theta)$ (véase figura 3.6a), y por tanto dependen de θ , y son las raíces del denominador de (3.20). Nótese que las trayectorias semiclásicas en la región prohibida también son dibujadas (en color azul claro), y esto es debido a que en esta región las ondas propagantes se convierten a ondas evanescentes y se utiliza la sustitución $p_x \rightarrow ip_x$. Aunque la longitud de onda de Fermi diverge en esta región prohibida pudiendo romper la aproximación geométrica,

¹²En la región de interfaz, donde el potencial electrostático tiene un cambio lineal suave, se pueden considerar regiones pequeñas con un potencial constante para ver la validez la ley de refracción.

la continuación de las trayectorias hacia la otra región clásica permitida acuerda bien con los cálculos cuánticos de la corriente.

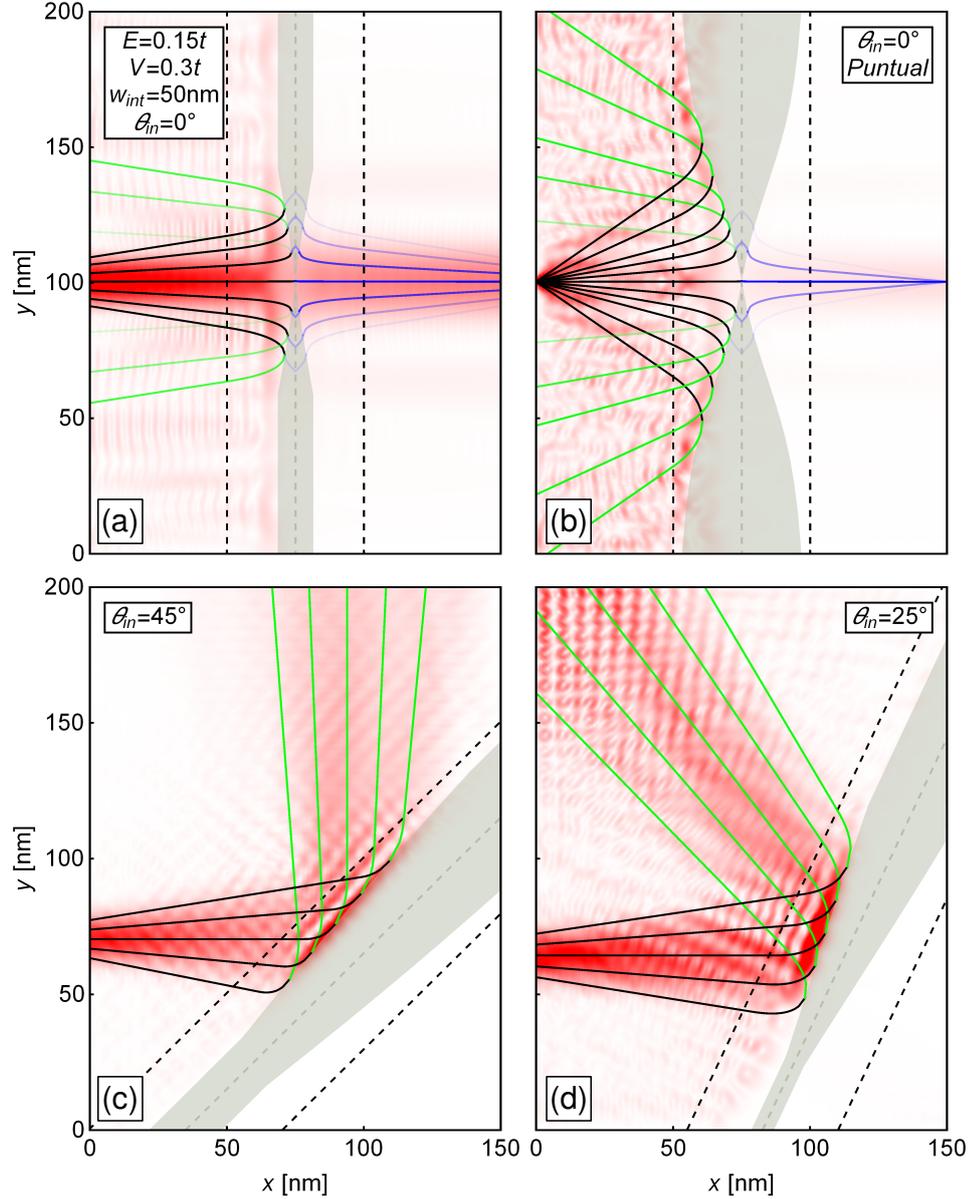


Figura 3.9: Flujo de corriente en uniones pn rectas de grafeno con un cambio suave en la interfaz ($w = 50$ nm). La región de la interfaz es delimitada por las líneas rayadas negras (ver figura 3.5a)). Los puntos donde el electrón va de la banda de conducción a la banda de valencia son indicados por la línea rayada gris. Las trayectorias semiclásicas (líneas sólidas) concuerdan bien con la densidad de corriente NEGF (degradado rojo). La zona clásicamente prohibida está indicada por la zona sombreada gris. En el borde la región prohibida, la densidad de corriente se acumula y las trayectorias se reflejan. Note que la forma de la zona prohibida para la incidencia normal [(a),(b)] depende de la difracción del haz electrónico inyectado, la cual es determinada en base a la figura 3.7a.

Hasta ahora la discusión se ha centrado en el caso de uniones pn , donde ocurre una transición interbanda. Para el caso de las uniones nn' y pp' , donde los electrones se mantienen en la misma banda, el comportamiento del flujo de corriente es cualitativamente distinto. En la figura 3.10 se muestra el caso de un haz de electrones muy estrecho (y por tanto muy divergente) desde el borde izquierdo de la nanocinta de grafeno con este tipo de uniones. En contraste con la unión pn (figura 3.9b), la transmisión de la corriente a través de la región de interfaz (líneas rayadas) es mucho mayor. Esto es debido en las uniones nn' y pp' la mayoría de los electrones inyectados no tienen una región prohibida; también por esto las trayectorias semiclásicas no cambian de color. Aunque es de notarse que para la unión nn' existe un ángulo crítico a partir del cuál hay reflexión total, como se ven en la trayectoria más externa de la figura 3.10a, por el surgimiento de la zona prohibida. Se observa que el efecto de la unión nn' en la configuración $|n_n| > |n_{n'}|$ ¹³ (figura 3.10a) realza la divergencia del haz de electrones, mientras que la unión pp' en la configuración $|n_p| < |n_{p'}|$ (figura 3.10b) reduce esta divergencia, similar a una lente convergente.

¹³Para describir la configuración de n , se hace referencia a los recuadros de la derecha superior de los paneles en la figura 3.10. Se considera la región anterior a la región de interfaz como la no primada y a la posterior como la primada. En este sentido, para el caso de la figura 3.10a, la diferencia entre la energía E y potencial $V(\mathbf{r})$ es mayor en la región n , y por tanto el valor del índice de refracción n , que en la región n' ; por ello, la configuración es $|n_n| > |n_{n'}|$. Para la figura 3.10b es el caso contrario, en la región p la diferencia mencionada es menor que en la región p' , por ello que es la configuración $|n_p| < |n_{p'}|$.

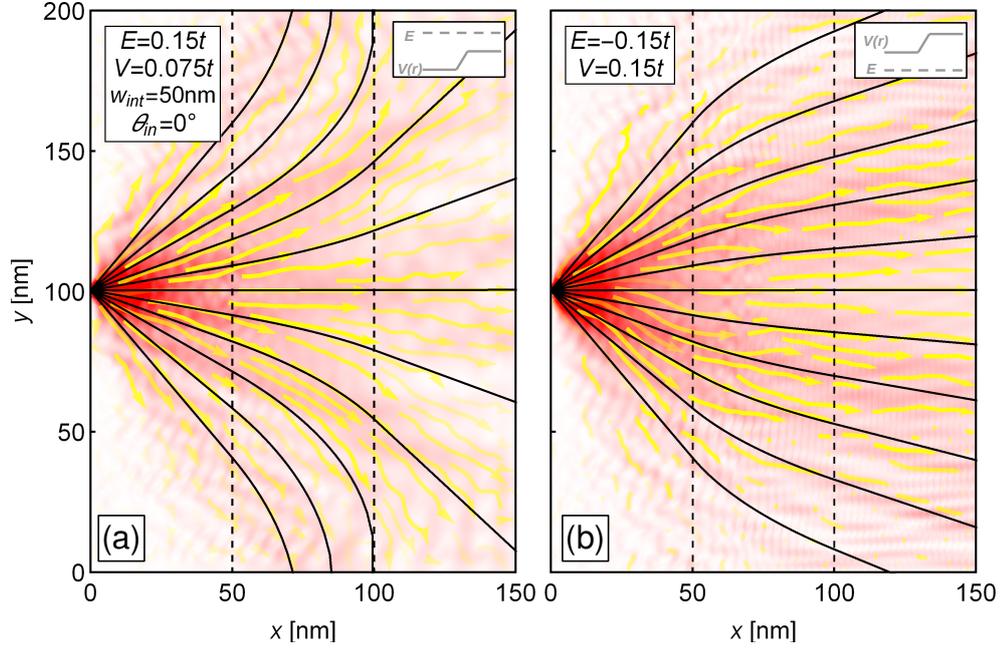


Figura 3.10: Óptica electrónica en uniones suaves nn' (a) y pp' (b); en la parte superior derecha la configuración para n (véase pie de página 13). Los electrones son inyectados como un haz muy estrecho, similar a una fuente puntual. La transmisión de la corriente es significativamente mayor que en el caso de la unión pn , donde sólo los electrones con incidencia normal se transmiten (compárese con la figura 3.9b). Las trayectorias semiclásicas (curvas negras) acuerdan con el flujo de las líneas de corriente (flechas amarillas) para cada caso.

3.2.2. Uniones pn circulares

Ahora se considerarán las uniones pn circulares, en las cuales surgen algunos efectos similares que en las uniones rectas.

Como se mencionó antes, la suavidad de la unión circular está dada por el parámetro α en (3.15); así, una unión pn con interfaz abrupta, donde el potencial electrostático aplicado en la región fuera de r_0 es cero y dentro de esta región es V , es obtenida usando $\alpha \rightarrow \infty$; al igual que para las uniones rectas abruptas, el cambio repentino de potencial electrostático no percibe la existencia de una región prohibida. En las figuras 3.11a-b se muestran dos uniones pn circulares abruptas, donde se observa que una parte de la corriente inyectada por el borde izquierdo es deflectada alrededor de la interfaz de la unión, mientras que otra entra a la región p enfocándose en un único punto [6]. En estas sistemas, a parte de esbozar las trayectorias semiclásicas incidentes, reflejadas, y transmitidas al interior (región p) y exterior (región n) de la unión, también se dibujan trayectorias (verdes) referentes a reflexiones internas; la opacidad de estas trayectorias está relacionada con los coeficientes de transmisión y reflexión de la ecuación (3.24).

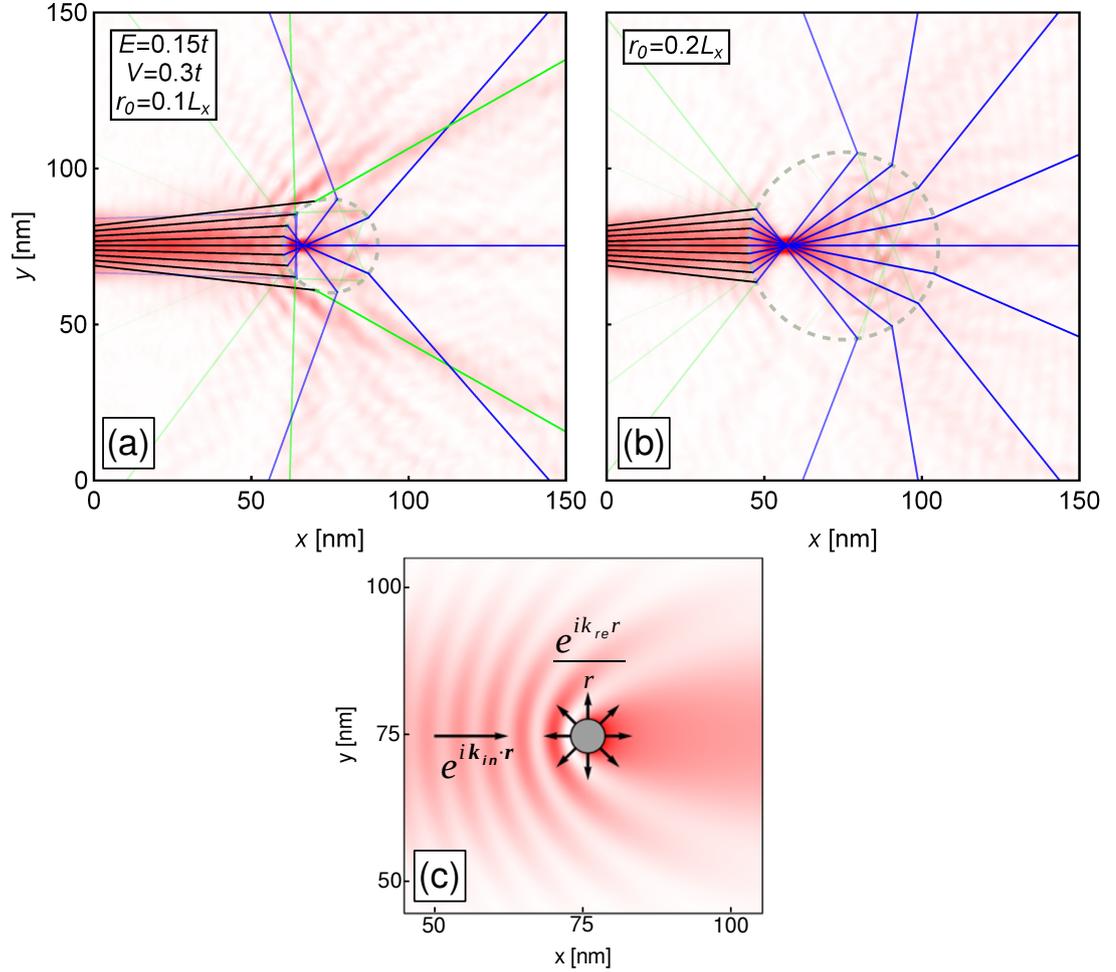


Figura 3.11: Flujo de corriente en uniones pn circulares abruptas [(a),(b)]. El potencial electrostático cambia abruptamente en la línea rayada gris de $V = 0$ (exterior) a $V = 2E$ (interior). Se observa que surge un único punto focal dentro de la unión (región p , dentro del círculo rayado gris). Fuera de la unión (región n), los electrones son dispersados de forma divergente. (c) Interferencia de un haz electrónico que incide como onda plana (con perfil gaussiano, $A(\mathbf{r})$ ec. (2.30)) y uno que se refleja como onda esférica, $|A(\mathbf{r})e^{ik_{in}\cdot r} + e^{ik_{re}r}/r|^2$. En (a) y (b), las trayectorias semiclásicas acuerdan bien con el flujo de corriente dentro de la unión, mientras que fuera de la unión las trayectorias no pueden reproducir los efectos de interferencia entre el haz incidente y el haz reflejado en la interfaz (onda esférica), como muestra el patrón ondulatorio en (c).

En el interior de la unión, las trayectorias semiclásicas transmitidas acuerdan con el punto de enfoque que hace el flujo de corriente, además de que las trayectorias de las reflexiones internas señala la cáustica que el flujo de corriente también hace al interior [6, 12, 14, 16]. Sin embargo, en el exterior de la unión las trayectorias semiclásicas no acuerdan muy bien con los cálculos cuánticos de la corriente. Este desacuerdo puede ser

explicado la naturaleza ondulatoria de los electrones, que al igual en para las uniones rectas, generan patrones ondulatorios productos de la interferencia entre la función de onda incidente y la reflejada por la interfaz de la unión. En este caso de las uniones circulares, la interfaz es circular y por tanto la onda electrónica reflejada está dada (aproximadamente) como una onda esférica; este hecho genera que la interferencia con la onda plana incidente sea en una región mucho mayor que en el caso de las uniones rectas. El patrón de interferencia resultante con este modelo se muestra en la figura 3.11c, el cual acuerda cualitativamente con el patrón ondulatorio de la corriente en el exterior de la unión pn (véase figuras 3.11a-b). Esto también demuestra las limitaciones de la óptica geométrica en la descripción de las trayectorias electrónicas en las uniones pn circulares. Adicionalmente, en la figura 3.11 se puede notar que cuando el radio de la unión se reduce, la incidencia de los electrones laterales se vuelve más rasante y una parte se desvía alrededor de la interfaz.

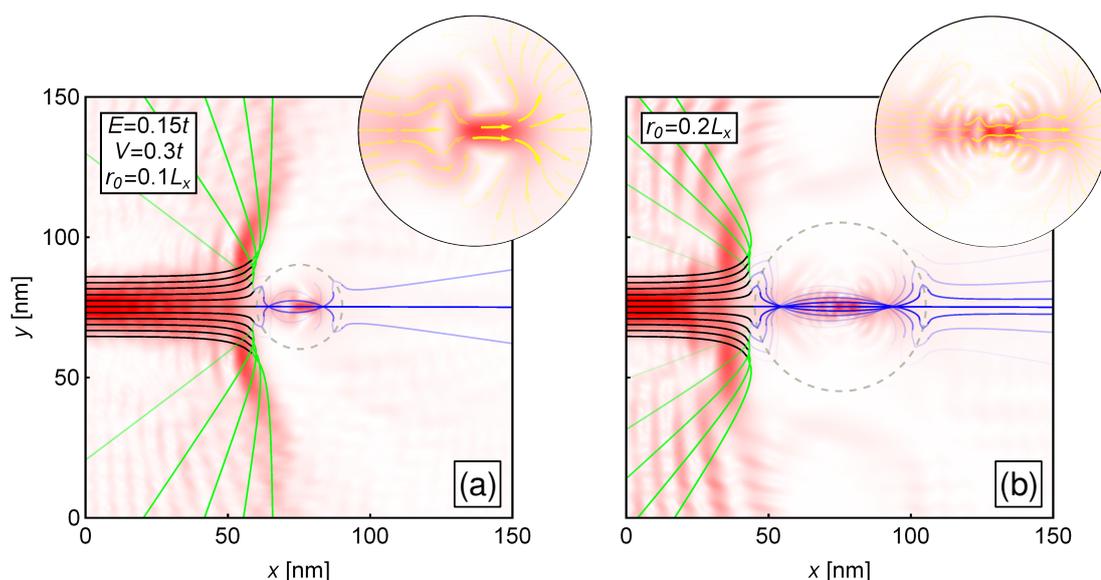


Figura 3.12: Óptica electrónica de índice gradual en uniones suaves pn circulares ($\alpha = 2$). El círculo rayado indica la isolínea $V(\mathbf{r}) = E$, llamada *línea de interfaz*. El flujo de corriente y las trayectorias semiclásicas (ec. (3.22)) concuerdan de forma cualitativa. La diferencia entre este acuerdo se explica por la existencia de una región prohibida energéticamente alrededor de la isolínea, la cual promueve reflexiones fuera de la unión (figura 3.11c) así como interferencia entre las reflexiones internas, produciendo ésto último un patrón ondulatorio. La interfaz de la región prohibida está indicada por el punto donde las trayectorias cambian de color negro a verde y de azul claro a azul. La imagen incrustada para cada figura muestra un acercamiento con líneas de corriente del interior de la unión pn .

Cuando el perfil del potencial electrostático aplicado es suave ($\alpha = 2$), se obtiene una unión circular con un cambio gradual del índice de refracción, la cual es ciertamente el dispositivo más atractivo para la óptica electrónica de gradiente de índice. Estos

dispositivos ya han sido realizados experimentalmente [30, 42, 43] (ver figura 3.5d). En la figura 3.12 se muestra el calculo cuántico del flujo de corriente, así como las trayectorias semiclásicas, para dos casos de estos dispositivos de gradiente de índice, donde estos dos métodos tiene un acuerdo aproximado, pero que este desacuerdo es debido a la existencia de las regiones energéticamente prohibidas. Dado que el haz de electrones se inyecta desde el borde izquierdo de la nanocinta, la figura 3.6b muestra que para estas uniones circulares suaves existen tres regiones prohibidas para los electrones: la primera al pasar a través de la isolínea que marca el cambio entre la región n y la región p (línea gris rayada), llamada línea de interfaz para este caso, la segunda al interior (región p) de la unión y la tercera al pasar de la región p hacia la región n ; y entre ellas hay regiones permitidas. Las trayectorias semiclásicas al interior de la unión siempre son tangentes a la segunda zona prohibida, y están en una zona permitida. Esto indica que hay una zona prohibida, por donde los electrones pasan a través de ella por tunelamiento cuántico, alrededor de toda la línea de interfaz y que al interior de la unión la región es clásicamente permitida. El coeficiente de transmisión nuevamente depende del tamaño de esta zona prohibida, que a su vez depende del momento angular l con el que es inyectado el electrón, y tiene la expresión

$$T_{\text{cir}} = e^{-2 \int_{r_1}^{r_2} dr' \sqrt{n^2(r') - l^2/r'^2}}, \quad (3.26)$$

donde r_1 y r_2 son los límites de la región prohibida, y dependen del ángulo de incidencia θ que es alrededor de θ_{in} . Las trayectorias evanescentes de la región prohibida se dibujan en azul claro en la figura 3.12, y también la opacidad de todas las trayectorias depende de este coeficiente de transmisión.

Es por la existencia de la región prohibida que una gran parte del haz de electrones inyectado es reflejado, causando un patrón ondulatorio al exterior de la unión mucho más pronunciado que en las uniones circulares abruptas (véase figura 3.11). También, de forma similar que en las uniones pn rectas suaves (figura 3.9), se puede observar una acumulación de corriente en el borde de la región prohibida, la cual es indicada por las trayectorias semiclásicas en el cambio de trayectorias incidentes (curvas negras) a reflejadas (verdes) y evanescentes (azul claro). El tamaño de la región prohibida es muy pequeño para los electrones con incidencia (cercana) normal a la línea de interfaz (véase figura 3.6b) y estos electrones pasan de forma sencilla al interior de la unión pn , pero debido a que dicha región prohibida persiste alrededor de la línea de interfaz, los electrones son confinados y surgen múltiples reflexiones internas que interfieren entre ellas y producen un patrón ondulatorio (véanse imágenes incrustadas de la figura 3.12). Esta interferencia da lugar al desacuerdo entre las trayectorias semiclásicas y el flujo de corriente calculado cuánticamente al interior de la unión. Además, para algunos conjuntos de parámetros (véase figura 3.13a) se puede observar un patrón de interferencia extremadamente pronunciado en el interior de la unión, dando lugar a los *Modos de Galería Susurrantes* o *Whispering Gallery Modes* (WGM) [17, 30, 41, 78, 79].

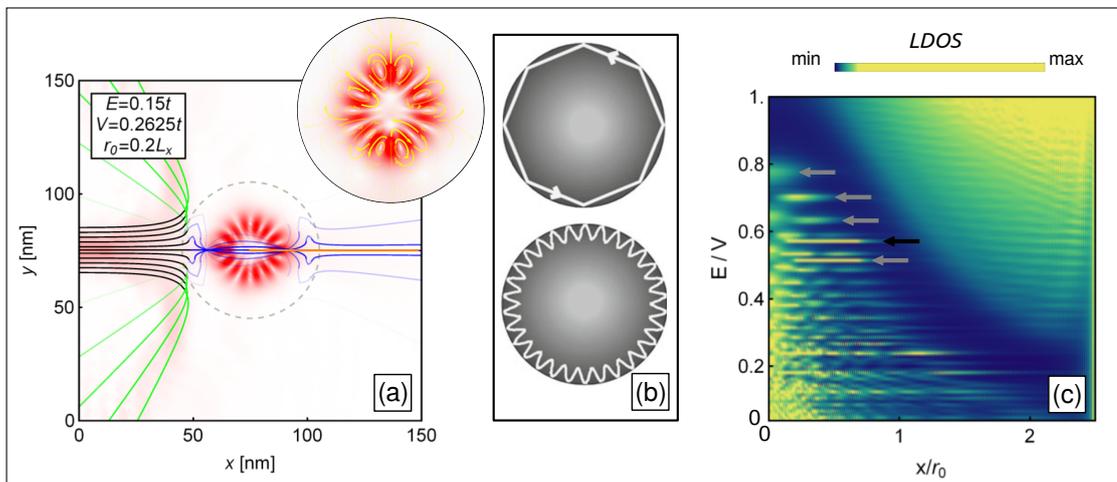


Figura 3.13: Óptica electrónica de índice gradual en uniones suaves pn circulares ($\alpha = 2$), con la condición $V = 1.75E$ (a). Patrón de fuerte interferencia que forma los *Whispering Gallery Modes* (ver el acercamiento superior) que puede observarse para parámetros específicos. (b) Representación esquemática de los WGM desde la óptica geométrica (superior) y la óptica ondulatoria (inferior); figura modificada de [93]. (c) Mapa de la LDOS (ec. (2.8)) tomada sobre la línea naranja de (a), variando la energía de inyección de los electrones E respecto al valor del potencial Lorentziano V (ec. (3.15)). Las flechas grises indican algunos valores donde se generan resonancias en la LDOS y por tanto los WGM, mientras que la flecha negra indica los parámetros para la figura (a).

Como se muestra en la figura 3.13b, los WGM son producidos por el confinamiento de los electrones en el interior de la unión donde la trayectoria de rayos se describe reflexiones totales internas dentro de una cavidad circular, pero su imagen ondulatoria de está dada como lóbulos o pétalos, por la interferencia; véase acercamiento de la figura 3.13a. Debido a la existencia de la región prohibida alrededor de la línea de interfaz, se genera el efecto de una cavidad, donde los electrones entran como ondas evanescentes y tienen las trayectorias de los WGM, produciendo estos patrones de pétalos en la densidad de corriente [94]. Para determinar las condiciones de confinamiento de los electrones por la unión pn de modo que se produzcan WGM, se buscan las resonancias en la densidad local de estados (LDOS) al variar los valores de los parámetros de la unión, como lo es la energía de inyección respecto al potencial electrostático aplicado [30, 79]. En la figura 3.13c se muestra el mapa de la LDOS que se calculó en los sitios de la línea naranja de la figura 3.13a, donde este cálculo fue a partir del método NEGF en la aproximación de amarre fuerte; véase ecuación (2.8). Se mantuvo el perfil del potencial electrostático fijo, V y r_0 , y se varió la energía de inyección de los electrones al sistema, E . Las flechas en la figura indican algunas relaciones entre E y V que producen las resonancias en la LDOS, y donde se generan los WGM¹⁴.

¹⁴El hecho que el mapa de la LDOS esté en función de las relaciones E/V y x/r_0 , sugiere que los valores de estas relaciones son las que de se deben de buscar para generar los WGM, pudiendo cambiar el valor de V y r_0 .

Este tipo de dispositivo, que generan WGM en el interior de la unión pn , buscan usarse como sensores de campos magnéticos o eléctricos externos [95], filtros fotónicos o moduladores de señal [94].

Cuando se estudia la transición de una unión circular suave a una con interfaz abrupta, incrementando el valor del parámetro α en (3.15), se observa una modificación del patrón de la corriente al interior la unión. En la figura 3.14 se muestra una parte de esta transición, donde además se pueden observar los patrones de interferencia de el interior de la unión, los cuales dependen de la sensibilidad de la suavidad de la unión. Conforme la interfaz de la unión se va haciendo más abrupta, la densidad de corriente es mayormente dispersada y el punto de enfoque de la corriente al interior de la unión se mueve del centro de ésta (véase figura 3.12b) hacia el borde izquierdo (lado donde incide el haz de electrones) de la línea de interfaz (véase figura 3.11b).

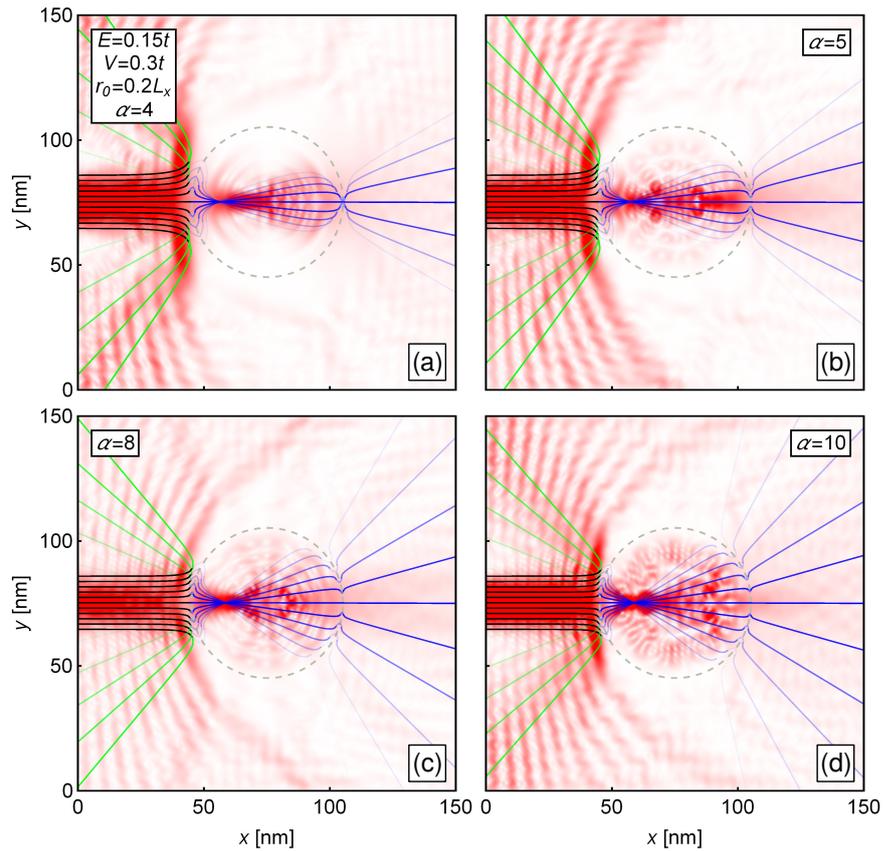


Figura 3.14: Flujo de corriente en uniones pn circulares con distinta suavidad. Cuando el parámetro α incrementa en (3.15), la unión se vuelve menos suave, la densidad de corriente incrementa su dispersión y el punto focal se mueve del centro de la unión (ver figura 3.12b) hacia la izquierda (ver figura 3.11b). Adicionalmente, se pueden ver que el patrón ondulatorio dentro de la unión depende fuertemente del valor de α .

Ahora, considerando las uniones nn' y pp' circulares en grafeno (figura 3.15) se observa que la imagen del flujo de corriente tiene un mayor cambio entre ellas con respecto a las uniones rectas (figura 3.10), y de hecho el efecto generado con la unión nn' es distinto al que produce la unión pp' .

En el caso de la unión nn' en configuración $|n_n| > |n_{n'}|$ (véase recuadro de la figura 3.15a para la configuración), el potencial Lorentziano aplicado actúa como un divisor de haz, el cual incluso separa electrones una diferencia pequeña en el momento angular. Una vez más, las trayectorias semiclásicas, obtenidas por la ecuación (3.22), y los cálculos de la densidad de corriente tienen un acuerdo muy visible; también, estas trayectorias indican que el tunelamiento de Klein persiste para electrones con incidencia normal (momento angular cero). Por otro lado, la unión pp' circular en la configuración $|n_p| < |n_{p'}|$ se comporta como una lente convergente (véase figura 3.15b), ya que enfoca a la corriente en un punto único frente al radio del potencial (círculo punteado).

En contraste con el régimen de las uniones pn circulares suaves, en las uniones nn' y pp' el patrón ondulatorio de interferencia disminuye considerablemente debido a que, al igual que para las uniones rectas, para la mayoría de los electrones del haz incidente no hay zonas prohibidas. Esto hace a las uniones nn' y pp' un escenario ideal para realizar dispositivos de óptica de gradiente de índice en grafeno. Es importante mencionar que, de acuerdo a la definición (3.17), el índice de refracción es siempre positivo para la unión nn' y siempre positivo para la unión pp' . Adicional a esto, se demuestra que la óptica electrónica de gradiente de índice está en alineada con el principio de la óptica de la luz incluso con refracción negativa, ya que “los rayos se desvían hacia la región con mayor índice de refracción” [92, p. 132].

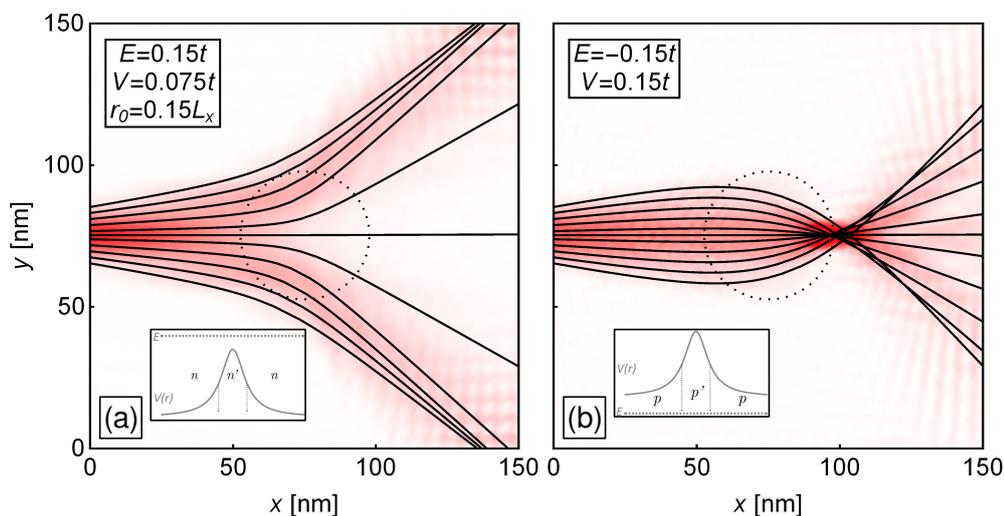


Figura 3.15: Flujo de corriente en uniones suaves nn' (a) y pp' (b) circulares; la configuración de n en el recuadro inferior (véase pie de página 13). El primer caso representa un divisor de haz muy eficiente, mientras que el segundo actúa como una lente convergente. Se observa nuevamente que las trayectorias semiclásicas y el flujo de corriente coinciden. El círculo punteado indica el radio del potencial Lorentziano aplicado.

3.2.3. Lentes GRIN en grafeno

Como una prueba de concepto de la óptica electrónica de gradiente de índice, se aplica la técnica desarrollada en las subsecciones anteriores a dos lentes de gradiente de índice (GRIN, por *GRadient-INdex*) bien conocidas en la óptica y la acústica: la Lente de Luneburg y la Lente generalizada de Maxwell. En este contexto, se toma la expresión del índice de refracción de la lente GRIN, y a partir de la ecuación (3.17) se determina el potencial electrostático $V(\mathbf{r})$ que se requiere aplicar a la nanocinta de grafeno. La funcionalidad de estos dispositivos de la óptica electrónica en grafeno es demostrada en la figura 3.16.

La lente de Luneburg [96] tiene el efecto de que cualquier haz colimado (paralelo) que incida de cualquier dirección lo enfoca en un único punto sobre la su superficie. Por este efecto que produce, la lente de Luneburg se ha propuesto como antena de microondas, escáner de ángulo sólido detectando fuentes de diversas direcciones o como retroreflector de radar [97–99]. Su índice de refracción gradual está dado como

$$n(\mathbf{r}) = n_0 \begin{cases} \sqrt{2 - (r/r_0)^2} & \text{para } r < r_0 \\ 1 & \text{otros casos,} \end{cases} \quad (3.27)$$

donde $n_0 = E/v_F$ es el índice de refracción sin potencial electrostático aplicado. En la figura 3.16a se muestra como al aplicar el potencial electrostático $V(\mathbf{r})$ adecuado para obtener el índice de refracción (3.27) (véase recuadro inferior), un haz de electrones colimado que se incide a la lente es enfoca en un único punto en su superficie (curva gris rayada), donde este punto es contrario a la dirección de incidencia del haz, que es el mismo efecto de una lente de Luneburg en óptica y acústica.

El índice de refracción de la Lente generalizada de ojo de pescado de Maxwell [100–103], o simplemente lente generalizada de Maxwell, tiene la forma

$$n(\mathbf{r}) = n_0 \begin{cases} \frac{2}{(r/r_0)^{1+m} + (r/r_0)^{1-m}} & \text{para } r < r_0 \\ 1 & \text{otros casos,} \end{cases} \quad (3.28)$$

donde m es el parámetro que determina la función de la lente ($m > 0$). Esta lente, como su nombre lo indica, es una generalización de la clásica Lente de ojo de pescado de Maxwell ($m = 1$) propuesta en 1854. Estas lentes tienen la función de tomar un punto enfocado en la superficie de la lente y reenfocarlo en uno ($m = 1$) o dos ($m < 1$) puntos sobre la misma superficie de la lente, además de ser lentes GRIN esféricas consideradas libres de aberraciones y con óptimos caminos ópticos [102]. Cuando el reeфонque es en dos puntos, la distancia entre estos aumenta conforme el valor del parámetro m disminuye [101, 102]. Por el efecto de la lente de Maxwell, se han propuesto como antenas retrodirectivas [104] o acopladores en sistemas fotónicos [105], e incluso en fotografía; adicionalmente, se ha construido una lente generalizada de Maxwell de forma experimental usada como divisor de haz [103].

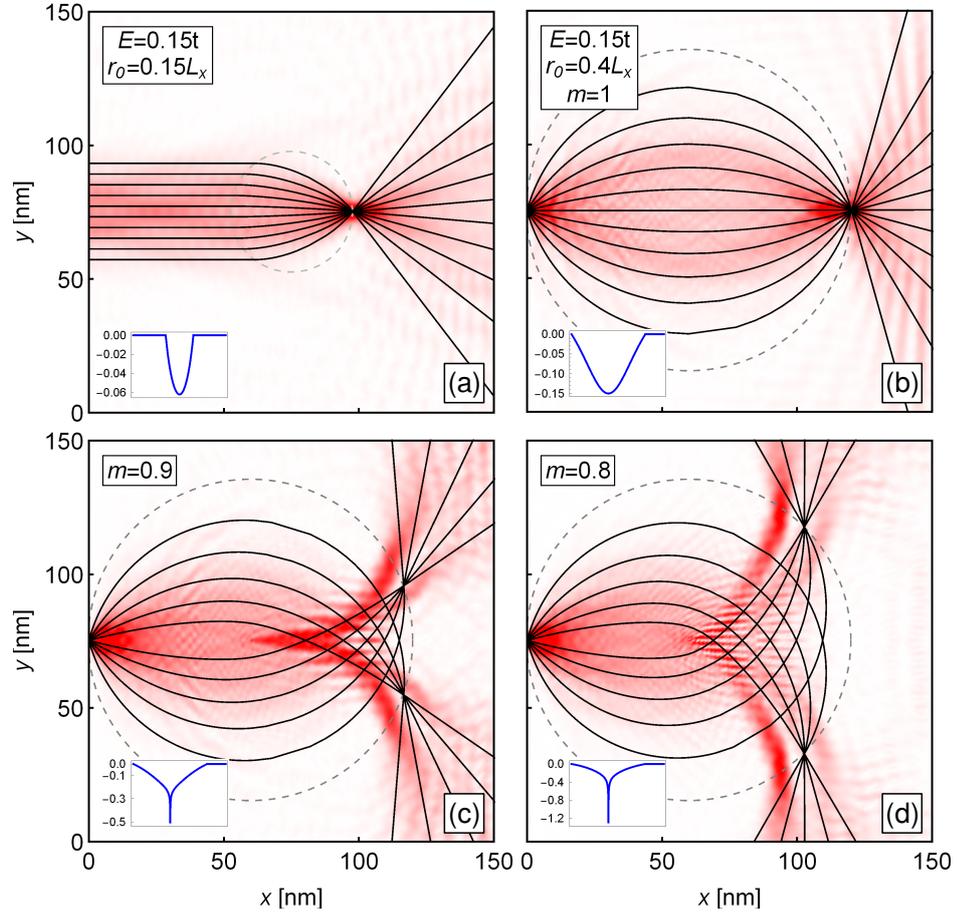


Figura 3.16: Flujo de corriente en grafeno con un potencial electrostático que genera una lente de Luneburg **(a)** y lentes generalizadas de Maxwell **[(b)-(d)]** con diferentes valores de m (ec. (3.28)). La lente de Luneburg recibe un haz colimado y lo enfoca en la superficie de la lente (círculo rayado gris), mientras que la lente Maxwell toma un punto enfocado en la superficie de la lente y lo enfoca nuevamente en puntos en la superficie; particularmente para $m = 1$, es el punto diametralmente opuesto. Los potenciales electrostáticos para generar estas lentes están dados por (3.27) y (3.28), respectivamente, y el perfil del potencial se muestra en el recuadro inferior de cada figura; la escala del potencial está en términos de t .

En las figuras 3.16b-d se muestra el flujo de corriente en una nanocinta de grafeno cuando se le aplica un potencial electrostático para obtener el índice de refracción (3.28) para distintos valores de m (véase perfil en recuadro inferior). Para este caso, se inyecta un haz de electrones muy estrecho, para simular una fuente puntual, en la superficie de la lente. Para el caso de $m = 1$ se aprecia que la fuente puntual de electrones es enfocada en el punto diametralmente opuesto sobre la superficie de la lente, que es efecto de la lente clásica de Maxwell; además de que las trayectorias semiclásicas acuerdan fuertemente con el flujo de corriente. Para los casos de $m < 1$, se demuestra

que el haz puntual inyectado en la superficie se divide en dos haces, denominados haces secundarios, que también se enfocan en la superficie de la lente, y que la distancia entre estos dos puntos aumenta conforme el valor del parámetro m disminuye. Adicional a esto, se observa que cada haz secundario se vuelve a dividir nuevamente, de modo que las trayectorias semiclásicas sólo describen a una parte de este haz. La división de los haces secundarios se atribuye a una interferencia entre el haz que sigue las trayectorias inferiores y el haz que sigue las trayectorias superiores, pues donde los caminos de estos dos haces se cruzan (donde las trayectorias semiclásicas se cruzan) comienza esta división de cada haz secundario. En la figura 3.17a se muestra el sistema de la figura 3.16d agrandado, donde ahora la inyección del haz no es por el borde izquierdo sino al interior del sistema (punto de inyección indicado por la flecha morada); se observa que la división de los haces secundarios sigue sucediendo, lo que indica que este efecto no es producto de la interferencia con la corriente reflejada por los contactos (en los bordes) del sistema. Además, en la figura 3.17b se muestra el flujo de corriente para el sistema anterior, con el perfil del potencial truncado¹⁵, el cual no es significativamente distinto al flujo de corriente en la figura 3.17a. Esto sugiere que se puedan manejar estos potenciales truncados para generar las lentes generalizadas de Maxwell en grafeno.

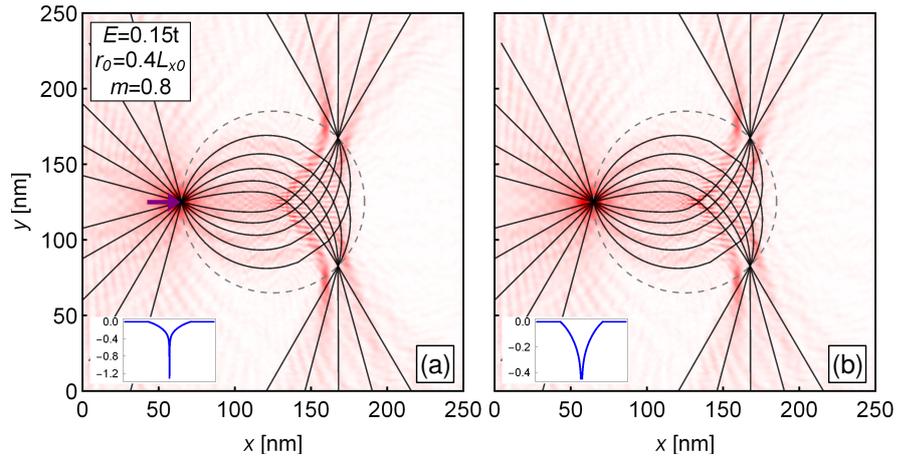


Figura 3.17: Lente generalizada de Maxwell, donde la inyección del haz de electrones es al interior del sistema indicado por la flecha morada, con $L_{x0} = 150$ nm (véase figura 3.16d). En (b) se muestra el flujo de corriente con el perfil del potencial truncado. El perfil del potencial electrostático aplicado para generar la lente se muestra en el recuadro inferior de cada figura; la escala del potencial está en términos de t . Se observa que la división de los haces se conserva, producto de interferencia dentro de la lente.

¹⁵Con el potencial truncado se hace referencia a que se evita el valor resonante del potencial en el centro de la lente, y se corta en una pequeña zona a un valor fijo del potencial; véanse los valores de los perfiles en ambas figuras 3.17, donde la reducción del potencial es en un factor de 3.

3.2.4. Geodésicas para las uniones pn en grafeno

Se han propuesto diversos modelos continuos para el grafeno deformado elásticamente, donde se describen a las excitaciones efectivas de los fermiones de Dirac sin masa por medio de un campo magnético artificial, donde resulta campo pseudomagnético generado por la deformación [50, 70, 75, 106]. Aplicando la aproximación eikonal, donde se hace la transición de la descripción de la óptica ondulatoria a la óptica de rayos y donde la “ecuación de movimiento” resultante es para la trayectorias de partículas puntuales, a la descripción de fermiones de Dirac no masivos en un espacio curvo, se obtiene la ecuación de las geodésicas en una superficie 2D curva dada.

En este sentido, considerando el tensor de deformaciones efectivo $\tilde{\underline{\epsilon}}$ aplicado a la nanocinta de grafeno para generar esfuerzos locales, se define la métrica (inversa) del espacio curvo continuo como

$$\tilde{g}^{ij}(\mathbf{x}) = \delta_{ij} - 2\tilde{\epsilon}_{ij}(\mathbf{x}). \quad (3.29)$$

Al considerar el potencial electrostático aplicado $V(\mathbf{r})$ en la nanocinta de grafeno, para generar las uniones pn circulares suaves, se obtiene la ecuación de las geodésicas para la nanocinta deformada y bajo un potencial electrostático externo

$$\frac{dv^i}{d\tau} + \tilde{\Gamma}_{kl}^i v^k v^l = \sqrt{\tilde{g}} \tilde{g}^{ij} \epsilon_{jk} v^k \tilde{B} + \tilde{g}^{ij} \left(-\frac{\partial V}{\partial x^j} \right) \mathbf{E}(\tau), \quad (3.30)$$

donde $v^i(\tau) = dx^i(\tau)/d\tau$ es la “velocidad”, $\tilde{\Gamma}_{kl}^i = \frac{1}{2} \tilde{g}^{ij} (\partial_k \tilde{g}_{jl} + \partial_l \tilde{g}_{kj} - \partial_j \tilde{g}_{kl})$ son los símbolos de Christoffel, ϵ_{ij} es el símbolo antisimétrico de Levi-Civita, $\tilde{B}(x^1, x^2)$ es el campo pseudomagnético asociado a la deformación y $\mathbf{E}(\tau) = [V(x^1(\tau), x^2(\tau)) - E(\tau = 0)]$ es la energía efectiva de los fermiones; $x^1 = x$, $x^2 = y$. Véase la subsección 3.3.2 para más detalles sobre la deformación elástica del grafeno y del campo pseudomagnético asociado a ésta.

Debido a que en lo anterior se han estudiado sólo las uniones pn circulares sin deformación ($\tilde{\underline{\epsilon}} = \tilde{0}$), se está en un espacio plano. Por tanto, la ecuación para las geodésicas de electrones descritos por la aproximación de Dirac (ecuación (3.10)) acoplados al potencial electrostático $V(\mathbf{r})$ se reduce a

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} \equiv \frac{d}{dt} \left(\frac{[E - V(\mathbf{r})] d\mathbf{r}}{v_F^2 dt} \right) = -\nabla V(\mathbf{r}), \quad (3.31)$$

donde el vector de momento $\mathbf{p}(r)$ a lo largo de la trayectoria $\mathbf{r}(t)$ satisface la relación de dispersión $[E - V(\mathbf{r})]^2 = v_F^2 |\mathbf{p}|^2$.

En la figura 3.18 se muestran las geodésicas (curvas naranjas rayadas) obtenidas para el caso de una unión pn circular previa (figura 3.12a) y donde se hace la comparación con las trayectorias semiclásicas obtenidas de la óptica geométrica (curvas negras). Se muestra que las trayectorias de la óptica geométrica son equivalentes a las geodésicas en la región clásica ($n > 0$) y que tienen una ventaja ante éstas últimas, pues las trayectorias ópticas describen el tunelamiento de los electrones a través de las

regiones prohibidas y tienen una propagación permitida en el interior de la unión. De esta forma, las trayectorias ópticas obtienen una descripción mucho más completa de la dinámica de los electrones en estos sistemas ante las geodésicas.

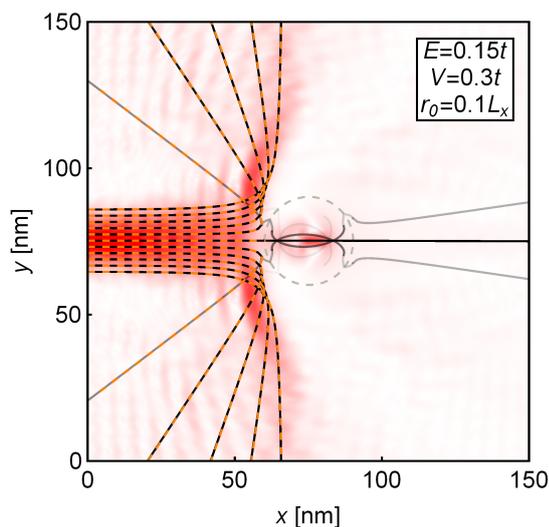


Figura 3.18: Flujo de corriente en unión suave pn circular. Las trayectorias semiclásicas (ec. (3.22)) se muestran en curvas solidas negras, mientras que las geodésicas (ec. (3.31)) son dadas por las curvas rayadas naranjas. Ambos métodos son equivalentes en las trayectorias reflejadas. Sin embargo, las geodésicas no pueden ser usadas para estimar las trayectorias de los electrones que se transmiten a través de la unión.

3.2.5. Conclusiones

En el trabajo de esta sección se investigó el flujo de corriente balística en uniones pn de grafeno abruptas y suaves, donde las uniones fueron rectas y circulares. Comparando los cálculos numéricos del transporte cuántico con las trayectorias semiclásicas, se demostró que el flujo de corriente en estos dispositivos se puede entender en gran medida mediante la óptica geométrica de gradiente de índice.

Para las uniones pn rectas, se confirmó la validez de la ley de Snell generalizada, así como se mostró los efectos de interferencia entre el haz incidente y el haz reflejado (figuras 3.7-3.9) y el surgimiento de una región prohibida cuando la interfaz es suave (figuras 3.9 y 3.6). Estas regiones prohibidas reflejan en gran medida la corriente, a excepción de los electrones con incidencia normal debido al tunelamiento de Klein. Estas uniones pn rectas suaves pueden ser usadas como generadores de haces de electrones estrechos y paralelos.

Centrando el estudio en las uniones pn circulares, cuando la interfaz es abrupta, una parte de la corriente entra al interior de la unión enfocándose en un único punto, lo que acuerda con la cáustica de las trayectorias semiclásicas (figura 3.11). Cuando el perfil de la unión se suaviza, se obtiene un índice de refracción que cambia gradualmen-

te. Las trayectorias semiclásicas en estos sistemas acuerdan de forma cualitativa con los cálculos cuánticos del flujo de corriente, pero las regiones prohibidas intensifican la interferencia al exterior e interior de la unión (figura 3.12). Esta interferencia intensa puede llevar para algunos parámetros específicos a la generación de WGM (figura 3.13). Finalmente, se demostró que las uniones circulares nn' y pp' actúan como divisores de haz y lentes convergentes (figura 3.15), dando lugar al diseño de dispositivos en la nanoelectrónica. Adicional a esto, se probó que es posible hacer lentes GRIN de la óptica y acústica con grafeno (figura 3.16), como la lente de Luneburg o la generalizada de Maxwell.

Las trayectorias semiclásicas son una herramienta eficiente para estimar el flujo de corriente en dispositivos de grafeno en nanoelectrónica cuando los efectos de interferencia de corriente no son predominantes, como en los casos del divisor de haz, la lente convergente o las lentes GRIN. Estas trayectorias son válidas en un régimen de longitudes que se resume como

$$\begin{array}{ccccccc} \text{constante} & & \text{longitud de onda} & & \text{escalas de longitudes} & & \text{camino libre} \\ \text{de red} & \ll & \text{del electron} & \ll & \text{características} & \ll & \text{medio.} \end{array}$$

En contraste, las simulaciones de NEGF son necesarias cuando la naturaleza ondulatoria de los electrones genera patrones de interferencia pronunciada que no pueden ser descritas por los métodos semiclásicos.

Los resultados presentados en esta sección contribuyen en el entendimiento del flujo de corriente local en las uniones pn suaves de grafeno y estimulan el estudio experimental de los distintos fenómenos surgidos en estos sistemas, así como guían eventualmente al diseño de nuevos dispositivos en la nanoelectrónica con grafeno.

3.3. Efecto de las uniones pn en grafeno con desorden y deformaciones elásticas

El estudio del transporte balístico a través de las uniones pn abruptas de grafeno ha dado cabida a que se pueda observar que haces de electrones sufren los fenómenos de tunelamiento de Klein [4, 9, 13, 18], donde los electrones atraviesan barreras de potencial cuando inciden cerca de la incidencia normal y no hay retrodispersión, y la refracción negativa [5, 28, 31]. Estos fenómenos excepcionales de la óptica en la materia condensada ha permitido diseñar dispositivos que tengan el efecto de la lente de Veselago [5, 28, 31, 38, 107], donde el cambio de índice de refracción de positivo a negativo (o viceversa) produce el resultado de una lente convergente, mediante estas uniones pn abruptas. Es por ello que este tipo de uniones son también consideradas como lentes de Veselago. Adicional a estos efectos, también se han estudiado estas uniones pn de grafeno con desorden o deformaciones elásticas en la monocapa.

Por el lado de uniones pn de grafeno con desorden, se ha considerado dicho desorden alrededor de la interfaz o en todo el sistema. Si el desorden está alrededor de la interfaz, se ha mostrado que éste realza la conductancia (y por tanto mejora el transporte

electrónico) cuando se le aplica un campo magnético perpendicular (efecto Hall cuántico) [108–111] o que el efecto de lente de Veselago es robusto cuando dicha amplitud de desorden es un orden menor al potencial electrostático que genera la unión [107]. También, si el desorden está en toda la monocapa de grafeno, el transporte tiende a ser difuso y las condiciones para obtener transporte balístico son marginales [112, 113]. Por otro lado, el estudio de las uniones pn en grafeno con deformaciones elásticas han sido mayormente estudiadas con deformaciones sobre el plano, y sólo recientemente fuera del plano. Para el caso de deformaciones elásticas unidimensionales, se ha encontrado que estos sistemas se pueden tomar como ventaja para controlar el flujo de corriente y que funcionen como polarizadores de valle [7, 40], lentes de Veselago asimétricas [39] o interruptores de corriente [77]; además, en combinación con desorden se observa un incremento de la conductividad en el efecto Hall [111]. Con las deformaciones fuera del plano se ha mostrado que se puede hacer un control del espín de valle en dispositivos cuánticos de Hall (uso campo magnético perpendicular externo) [114].

En esta sección se estudia los efectos de las uniones pn abruptas en el transporte electrónico cuando las nanocintas de grafeno tienen regiones de desorden o cuando sufren de deformaciones elásticas fuera del plano. Dichas lentes de Veselago son generadas mediante uniones pn con interfaz abrupta, que aunque no forman un punto focal definido, producen refracción negativa para el haz de electrones. También, se presentan las condiciones en las cuales estas uniones revierten la distorsión del flujo de corriente por estas modificaciones en la nanocinta de grafeno. Para los resultados que se presentarán a continuación se hace una extensión del sistema, con el objetivo de tener una mejor imagen del efecto que tienen las uniones pn de grafeno en el haz de electrones inyectado. Dicha extensión comienza a partir de un borde en el sistema denominado *borde de simetría*, que indica cuando tanto la región n como la p tienen el mismo tamaño en la unión. De este modo, por la simetría de la unión se espera que los resultados sean los mismos si la inyección es de derecha a izquierda (antes se ha sido consistente con la inyección de izquierda a derecha desde la región n).

3.3.1. Regiones de desorden en uniones pn

Han sido arduos los estudios de transporte electrónico en grafeno prístino, aunque es común que contraiga algún desorden en su proceso de síntesis. En general, este desorden se ha clasificado en varias categorías, como grafeno corrugado, defectos topológicos, vacancias, impurezas (adátomos) o defectos sp^3 [115]. En la categoría de impurezas, éstas pueden estar en la red del grafeno [116, 117], sobre ésta [118] o pueden estar cerca de la interfaz entre el sustrato y la capa de grafeno [113, 119–121]. Cuando las impurezas se encuentran en la red del grafeno, éstas tomar el papel de dispersores cargados. Si las impurezas están debajo de monocapa de grafeno, cerca de la interfaz

con el sustrato, también funcionan como centros que generan un charco de carga¹⁶. Con este último método, es posible tener regiones de desorden en grafeno, como lo muestra el dispositivo propuesto por Rossi *et al.* (figura 3.19d), donde las impurezas entre la interfaz del sustrato y el grafeno se concentran en grupos.

En lo que sigue, se estudia el flujo de corriente de un haz de electrones inyectado a una unión pn abrupta con regiones de desorden aleatorio.

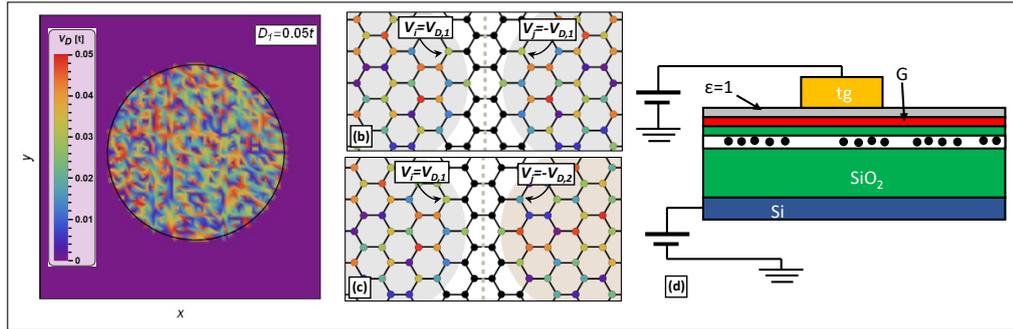


Figura 3.19: (a) Ejemplo de la distribución local del potencial de desorden en una región circular dentro de la región n de la unión; véase la escala del potencial y que fuera de la región el potencial es cero. Se observa que los valores del potencial de desorden tienen una distribución uniforme. (b),(c) Desorden aleatorio en la región p simétrico (b) y no simétrico (c) respecto a la región de desorden en la región n de la unión. El color de los sitios (misma escala que (a)) indica el valor del potencial local de desorden. En el caso simétrico, el sitio en la región n y su sitio reflejado respecto a la línea de interfaz (gris rayada) tienen el mismo valor de potencial de desorden ($V_{D,1}$), pero con signo contrario (región n positivo, región p negativo); para el caso no simétrico, los valores del potencial local de desorden $V_{D,1}$ y $V_{D,2}$ no tienen que ser iguales, como lo muestra la escala de colores. (d) Dispositivo propuesto por Rossi *et al.* [113] para generar charcos de carga mediante impurezas (puntos negros en zona blanca) entre el sustrato (verde) y la monocapa de grafeno (G, roja). tg se refiere a una compuerta superior de voltaje.

Para estudiar los efectos que tienen las uniones pn en grafeno con desorden, se generan regiones específicas de desorden mediante la aplicación de un potencial local en los sitios de la unión pn de grafeno. Esto puede ser posible agrupando impurezas por debajo del grafeno, en el sustrato. En la descripción de amarre fuerte, este desorden se implementa añadiendo un término de potencial local al Hamiltoniano (3.4) [57, 87], de modo que el Hamiltoniano del sistema se escribe como

$$H_D = H_{tb} + \left[\sum_{i \in \text{reg. } n} V_n |i\rangle \langle i| + \sum_{i \in \text{reg. } p} V_p |i\rangle \langle i| \right] + \sum_{i \in \mathcal{D}} V_i |i\rangle \langle i|, \quad (3.32)$$

¹⁶Un charco de carga es una región en el sistema que tiene una variación de potencial electrostático similar a la profundidad de un charco de agua, es decir, un “centro” más profundo (más cargado) que a las orillas va disminuyendo su profundidad (disminuyendo el potencial). Para referencias visuales véase [120, 121].

donde H_{tb} es el Hamiltoniano (3.4) que describe a la red del grafeno, los términos entre corchetes hacen la descripción de la unión pn abrupta y el último término refiere al potencial local de desorden en la región \mathcal{D} . La unión pn abrupta se implementa con un potencial electrostático externo y se expresa como una unión pn recta (3.14) con $w \rightarrow 0$ (véase figura 3.7), conduciendo a $V_n = 0$ y $V_p = V$. En el término del desorden, el potencial local de desorden tiene un valor aleatorio en un rango entre 0 y un valor máximo D , $V_i \in [0, D]$, donde esta aleatoriedad obedece a una distribución de probabilidad uniforme; al valor máximo de desorden D también se le denomina *amplitud de desorden*. Véase la figura 3.19a donde se muestra una región circular de desorden \mathcal{D} en la región n de la unión con una amplitud de desorden $D_1 = 0.05t = 140 \text{ meV}$.

Para comenzar la investigación de los efectos de las uniones pn abruptas en grafeno con desorden, se analiza el flujo de corriente calculado mediante el método NEGF, sobre un sistema de $100 \times 200 \text{ nm}$, con una extensión del sistema en la dirección x de 100 nm (que tiene un potencial externo aplicado de V). En la figura 3.20a se muestra la imagen del flujo de corriente en una unión pn simétrica ($V = 2E$ en ec. (3.14)) del haz inyectado desde el borde izquierdo de la nanocinta (región n) a una energía de $E = 0.15t = 420 \text{ eV}$. Al igual que en el caso de la figura 3.7b, se observa el fenómeno de refracción negativa y el reenfoque del haz en el borde de simetría (línea rayada negra) que se encuentra a los 200 nm (el doble de la posición de la interfaz -línea rayada gris-); en este reenfoque, el haz de electrones toma el mismo ancho del que tiene cuando es inyectado en el sistema. En esta figura no es difícil ver que si se inyectara el haz de electrones en el borde de simetría hacia la izquierda, la imagen del flujo de corriente sería la misma, sólo que en sentido opuesto, por ello el nombre de “borde de simetría”. Este reenfoque del haz de electrones es debido a que en la interfaz de la unión pn los electrones cambian el ángulo de su trayectoria sólo en dirección y no en valor, $\theta_{\text{tr}} = -\theta_{\text{in}}$ de acuerdo a la Ley de Snell generalizada (3.18) (véase figura 3.7b). Adicional al reenfoque del haz de electrones en el borde de simetría, se observa en la 3.20a que en la extensión del sistema el haz de electrones se colima mayormente, y sólo un poco de este haz tiene una divergencia pequeña (al igual que el haz inyectado). Debido que el haz de electrones se inyecta completamente con momento horizontal, esto hace referencia al comportamiento simétrico del transporte en la unión pn , pues indica que el haz de electrones después del borde de simetría conserva este momento horizontal. La difracción del haz de electrones en la región n es debido a la naturaleza ondulatoria de los electrones. El hecho que el haz de electrones se haya reenfocado en el borde de simetría y después de haya colimado, se denomina que el haz se ha *reconstruido*.

Para mostrar el impacto que tiene el desorden en el transporte en grafeno, se toma una unión pn con una región circular de desorden \mathcal{D}_1 en el lado izquierdo de la unión (región n) con un radio $r_r = 0.2L_y = 20 \text{ nm}$ ¹⁷ y un amplitud de desorden $D_1 = 0.05t \approx 0.33E$ (la figura 3.19a muestra un bosquejo de la distribución del potencial local de

¹⁷Recordando que la longitud de onda de Fermi asociada a la energía de inyección $E = 0.15t = 420 \text{ meV}$ es de $\lambda_F \approx 9 \text{ nm}$, el tamaño de la región de desorden es de $\sim 4.5\lambda_F$.

desorden de esta región \mathcal{D}_1). La posición vertical de \mathcal{D}_1 está alineada con la inyección del haz de electrones al sistema. La figura 3.20b muestra que la región de desorden \mathcal{D}_1 , indicada como una región sombreada morada, produce alteración en el flujo de la corriente (compárese con el flujo de corriente de la región n en la figura 3.20a) generando que la corriente se divida y también vaya hacia los bordes superior e inferior del sistema; al llegar a la interfaz de la unión, la corriente se refracta y se enfoca en una zona anterior al borde de simetría para después divergir intensamente. El hecho de que el foco del haz de electrones en la región p sea antes del borde de simetría, y por tanto el haz de electrones diverja, es debido a que buena parte de los electrones llegan a la interfaz con ángulos de incidencia grandes.

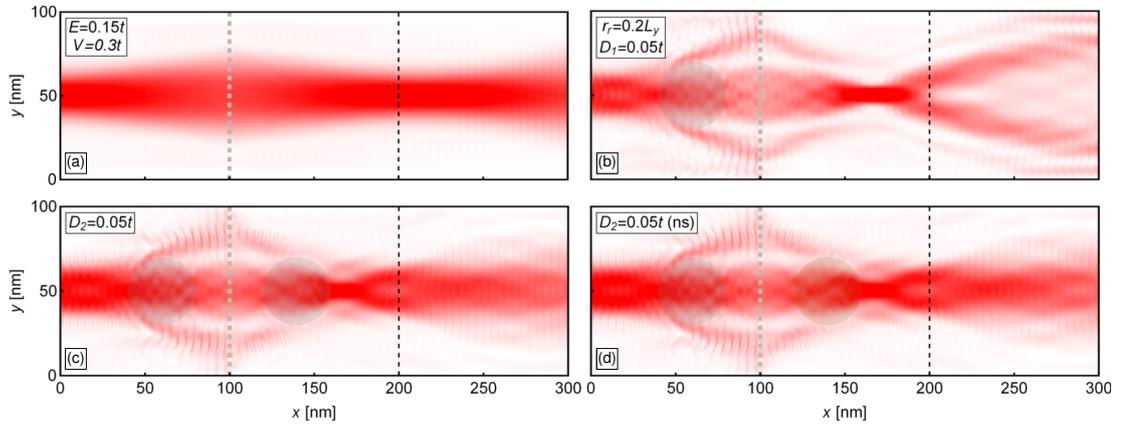


Figura 3.20: Flujo de corriente en unión pn abrupta simétrica sin desorden (a), con una zona circular de desorden \mathcal{D}_1 (radio r_r y amplitud de desorden D_1) en la región n (b), y con una zona de desorden \mathcal{D}_2 de amplitud D_2 en la región p simétrica (c) y no simétrica (d) (note el cambio de color de \mathcal{D}_2). La línea gris rayada indica la interfaz abrupta de la unión pn , mientras que la línea negra rayada marca el llamado *borde de simetría* donde la región n y la región p tienen el mismo tamaño y después de esta línea se tiene una extensión del sistema. Se observa en (a) que el haz de electrones inyectado recupera su tamaño en el borde de simetría y después se colima mayormente, es decir se reconstruye, mientras que en (b) el haz se enfoca antes y después diverge fuertemente; en el caso de dos regiones de desorden, pasa algo similar que en (a), donde el haz recupera su tamaño en la línea negra y después se colima mayormente.

Tomando ventaja de la simetría de la unión pn , se genera una segunda región de desorden \mathcal{D}_2 en la región p , que es una región reflejada de \mathcal{D}_1 respecto a la interfaz de la unión, tanto en la posición como en la distribución del potencial de desorden (por ello tiene el mismo tamaño y amplitud de desorden). Debido a que el potencial electrostático que genera la unión pn es $V = 2E$ en la región p , la energía efectiva de los electrones en esta región es $-E$; por ello, si en \mathcal{D}_1 el potencial local $V_i > 0$, para conservar la simetría de energía se asigna $V_i < 0$ en \mathcal{D}_2 . Aún más, en el sentido de que la distribución del potencial de desorden también tenga simetría de reflexión, si un sitio en \mathcal{D}_1 tiene un potencial local $V_{D,1}$, entonces el sitio reflejado respecto a la

interfaz de \mathcal{D}_2 tiene que poseer un potencial $-V_{D,1}$, como se muestra en la figura 3.19b. Con estas condiciones donde \mathcal{D}_2 es enteramente simétrica a \mathcal{D}_1 , en la figura 3.20c se muestra que el haz de electrones se reenfoca nuevamente en el borde de simetría debido a la presencia de \mathcal{D}_2 , y en la extensión del sistema se observa que gran parte éste se colima (véase el centro del haz) y disminuye significativamente su divergencia respecto al caso donde solamente estaba \mathcal{D}_1 , de modo que el haz de electrones se aproxima a reconstruirse. Esto sugiere que si se tienen dos regiones de desorden con una distribución de desorden simétrica, una unión pn abrupta simétrica puede revertir la alteración al flujo de corriente que generan dichas regiones de desorden.

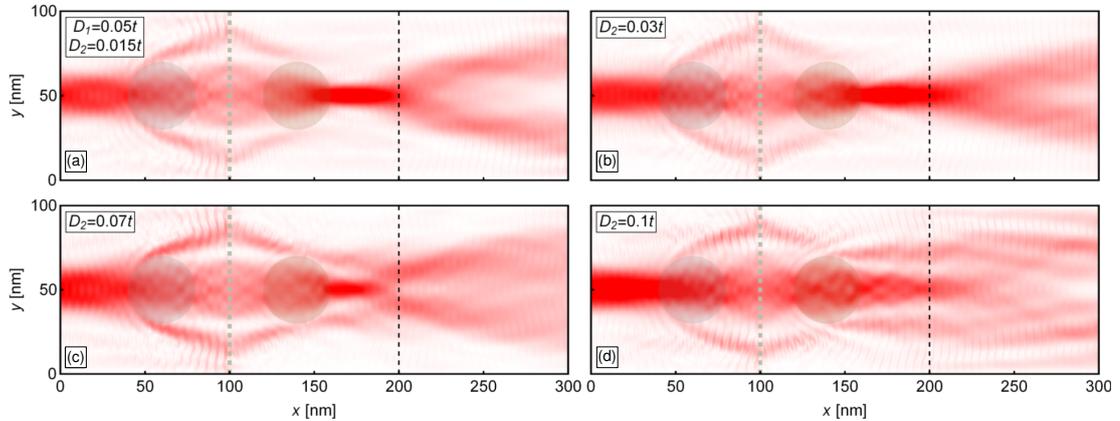


Figura 3.21: Flujo de corriente en una unión pn abrupta simétrica con dos regiones de desorden no simétricas de diferente amplitud de desorden. El tamaño del haz en el borde de simetría es menor o mayor al de inyección si la amplitud de desorden D_2 es menor o mayor a D_1 , respectivamente; compárese con la figura 3.20d donde el tamaño es el mismo cuando $D_1 = D_2$. Todas las regiones tienen radio $r_r = 0.2L_y$.

En la figura 3.20d se muestra que si se considera que la distribución del desorden en las regiones \mathcal{D}_1 y \mathcal{D}_2 no es simétrica (véase figura 3.19c), pero siguen conservando la amplitud de desorden, el comportamiento del flujo de corriente no es cualitativamente diferente al caso de distribución simétrica (compárese con figura 3.20c). En la figura 3.20 se muestra sólo una configuración de distribución de desorden con $D_1 = D_2 = 0.05t$, sin embargo es la representación de múltiples distribuciones de desorden realizadas, variando tanto la amplitud como la posición de la región de desorden. El hecho de que la distribución de desorden en \mathcal{D}_1 y \mathcal{D}_2 simétrica y no simétrica tengan los mismos resultados, cualitativamente relaja la condición de alta simetría en el desorden, lo que le quita al sistema estudiado menos idealidad. Por otro lado, si la amplitud de desorden de la región \mathcal{D}_2 no es la misma que en \mathcal{D}_1 , se aleja de la reconstrucción del haz de electrones por la unión pn . En la figura 3.21 se presentan tres sistemas donde la amplitud de desorden en \mathcal{D}_2 es distinta a la de \mathcal{D}_1 . Se puede notar que si la amplitud de desorden $D_2 < D_1$, el tamaño del haz de electrones en el borde de simetría es menor al tamaño del haz cuando se inyecta, mientras que si $D_2 > D_1$ el tamaño del

haz en este borde es mayor que el inicial. Además, para todos los casos se puede ver que el haz de electrones tiene una divergencia mayor en la extensión del sistema, en comparación con el caso de $D_2 = D_1$ (véase figura 3.20d). Para el caso $D_2 < D_1$, esto es debido a que la región \mathcal{D}_2 no alcanza a reenfocar el haz de electrones en el borde de simetría y lo enfoca en una zona antes de éste (similar a la figura 3.20b); cuando $D_2 > D_1$, la distorsión del flujo de la corriente es más grande que lo que hace la región \mathcal{D}_1 y por tanto \mathcal{D}_2 desvía la corriente hacia los bordes superior e inferior del sistema. Estos resultados sugieren que si las dos regiones de desorden tienen la misma amplitud de desorden, entonces la unión pn es capaz de reconstruir el haz de electrones.

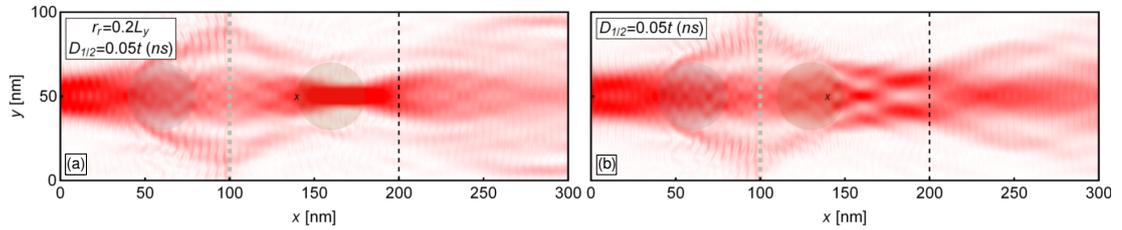


Figura 3.22: Flujo de corriente en una unión pn con dos regiones de desorden (distribución no simétrica) con la misma amplitud de desorden pero que no conservan simetría de reflexión respecto a la interfaz. La “x” marca como referencia el centro de la región circular si tuviera simetría de reflexión. Se muestra como cuando está más lejos de la interfaz, la corriente se enfoca antes del borde de simetría, y cuando es más cerca la interfaz, no existe un punto focal en la región p .

Es de importancia estudiar si la simetría de reflexión de las regiones de desorden influye en que la unión pueda reconstruir el haz de electrones, y sólo basta que tengan la misma amplitud de desorden. En la figura 3.22 se presenta la situación donde la región \mathcal{D}_2 no tiene simetría espacial de reflexión con \mathcal{D}_1 respecto a la interfaz de la unión. Para el caso donde \mathcal{D}_2 está más alejada de la interfaz que \mathcal{D}_1 (figura 3.22a), se observa que el haz de electrones se enfoca incluso dentro de la región. Este hecho genera que el haz diverja intensamente después del borde de simetría. Por el otro lado, si la distancia entre \mathcal{D}_2 a la interfaz es menor que \mathcal{D}_1 (figura 3.22b) se puede ver que parecería que el haz se enfoca justo después de la región de desorden, sin embargo la tiene una divergencia perceptible en la extensión del sistema. Para ambos casos, el haz de electrones tiene su foco antes del borde de simetría y la divergencia del haz después de éste es significativamente mayor al caso donde si se tiene una simetría de reflexión con las regiones de desorden; véase figura 3.20d. Estos resultados exponen que es imprescindible la condición de simetría de reflexión respecto a la interfaz de la unión pn para que ésta pueda reconstruir el haz en presencia de las dos regiones de desorden.

En todos los casos anteriores, las regiones de desorden estuvieron alineadas verticalmente con el haz de electrones inyectado. Ahora se estudiará que pasa con el flujo de corriente si se rompe esta simetría. En la figura 3.23a se muestra el caso donde la región de desorden \mathcal{D}_1 tiene una posición más hacia arriba de donde se inyecta el haz.

Por esta posición, la distorsión del flujo de corriente lo genera mayormente la parte inferior de \mathcal{D}_1 , provocando que el haz de electrones vaya hacia la derecha (como en casos anteriores) pero también en una cantidad significativa hacia el borde inferior; al llegar a la interfaz de la unión, se refracta negativamente haciendo que gran parte del haz siga hacia el borde superior en la región p , además de enfocar dicho haz antes del borde de simetría, seguido de que la parte del haz hacia abajo en la región n llega a la interfaz con ángulos de incidencia grandes. Si ahora se origina la segunda región de desorden \mathcal{D}_2 que es reflejada de \mathcal{D}_1 en posición respecto a la interfaz, la figura 3.23b expone que el haz de electrones es cercano a reconstruirse, pues el tamaño en el borde de simetría es muy similar al inicial y tiene poca divergencia en la extensión del sistema; esto ocurre incluso si la distribución del potencial de desorden es no simétrica como se muestra en esta figura. Con esto, se prueba que las uniones pn pueden reconstruir el haz de electrones en los casos donde las regiones de desorden no tienen la misma posición de paso del haz inyectado.

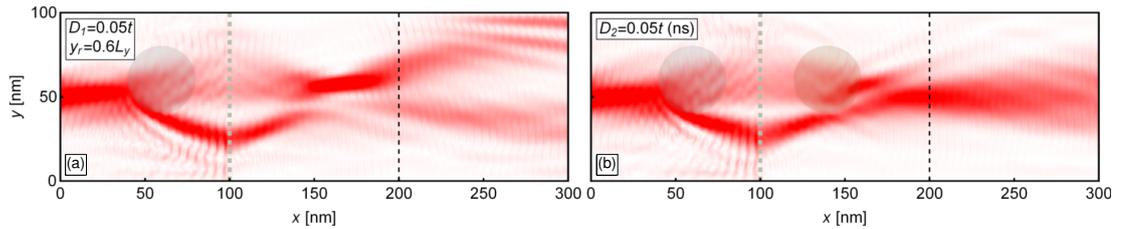


Figura 3.23: Rompimiento de la simetría vertical en la región del desorden. Se observa que el sistema de la unión pn con la segunda región (aún no simétrica) reconstruye el haz inyectado, de modo que recupera el tamaño inicial en el borde de simetría y se colima en su mayoría en la extensión del sistema.

3.3.2. Deformaciones elásticas en uniones pn

Las deformaciones elásticas producidas en una monocapa de grafeno generan un campo pseudomagnético que distingue el grado de libertad del valle en este material [50, 70, 74, 75, 106, 122, 123]. Al aplicar una deformación elástica al grafeno se modifican las posiciones de los átomos, y por tanto se modifican los enlaces entre ellos. Esta modificación de los enlaces se describe como un campo efectivo de recalibración (gauge) en el espacio recíproco, que funge como un campo vectorial efectivo generando el campo pseudomagnético mencionado. El campo de recalibración es diferente para cada polarización de valle de los electrones (\mathbf{K}^\pm) debido a que se debe conservar la simetría de inversión temporal [70, 75]. Han sido diversos tipos de deformaciones las que se han investigado respecto a las propiedades electrónicas en grafeno deformado: unidireccionales [106] y bidireccionales [11, 73] en el plano, ondulaciones [73, 124] y plegaduras [74, 125], dislocaciones [126, 127] y tipo burbuja/bache [50, 72, 75, 76, 123, 128–134]. Es de importancia mencionar que el campo pseudomagnético generado por deformaciones tipo burbuja puede llegar a ser mayor a 300 T [72].

Las deformaciones elásticas estudiadas en este trabajo se concentran en pequeñas deformaciones fuera del plano, que son descritas mediante una función de altura $h(x, y)$ (véase figura 3.24g). Estando en el régimen donde el cambio de posición de los átomos $\delta\mathbf{r}_i = \underline{\varepsilon}\mathbf{r}_i \ll a_0$, con $\underline{\varepsilon}$ es el tensor de deformaciones, es válido hacer la suposición de que los átomos de carbono de la red de grafeno sólo se desplazan en la dirección perpendicular $z_i = h(x_i, y_i)$ sin cambiar su posición original (x_i, y_i) [50, 106]; además, se evita la mezcla de los valles [70]. Debido al cambio de las posiciones en la red, el valor de los parámetros de acoplamiento entre los átomos se modifican ligeramente en (3.4), de modo que sus valores varían lentamente sobre la red como $t_{ij} = t + \delta t_{ij}$ (t es el parámetro de acoplamiento del grafeno sin deformación). Esta variación está sujeta al cambio en las distancias entre átomos y puede aproximar como¹⁸

$$t_{ij} \cong t e^{-\beta\delta r_{ij}}, \quad (3.33)$$

donde t es el parámetro de acoplamiento del grafeno sin deformación, $\delta r_{ij} = \frac{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| - a_0}{a_0}$ el cambio de distancia entre átomos y $\beta = 3.37$ es el parámetro de Grüneisen electrónico en grafeno [50, 70, 75, 106, 131, 135, 136]. Puesto que se está en el régimen de cambios pequeños, $\delta r_{ij} \ll a_0$, esta expresión se puede aproximar por la relación lineal $\delta t_{ij}/t = -\beta\delta r_{ij}/a_0$, lo que permite relacionarlo de forma lineal con el tensor de deformaciones $\underline{\varepsilon}$.

La modificación (3.33) de los parámetros de acoplamiento por las deformaciones elásticas se considera en el Hamiltoniano (3.4), de modo que ahora el Hamiltoniano en la descripción de Dirac (ec. (3.10)) para un espacio curvo está dado como¹⁹ [50, 70, 75, 136–139]

$$H_D^\pm = i v_F \sigma^j \tilde{e}_j^l(\mathbf{x}) \left(\partial_l - i\mathbf{K}_l^\pm - i\tilde{\mathbf{A}}_l^\pm(\mathbf{x}) \right), \quad (3.34)$$

donde σ^j ($j = x, y$) son las matrices de Pauli, $\tilde{\mathbf{e}}_j(\mathbf{x})$ es el vector unitario en el marco de referencia local, ∂_l la derivada direccional, \mathbf{K}^\pm son los valles del grafeno prístino (ec. (3.3)) y $\tilde{\mathbf{A}}^\pm(\mathbf{x})$ es el campo vectorial efectivo inducido por la deformación ($\tilde{\mathbf{A}}^\pm$ corresponde al valle \mathbf{K}^\pm), y que da origen al campo pseudomagnético $\tilde{\mathbf{B}}^\pm(\mathbf{x}) = \nabla \times \tilde{\mathbf{A}}^\pm(\mathbf{x})$. Para preservar la simetría de inversión temporal, este campo vectorial efectivo debe ser opuesto en signo para los dos valles no equivalentes, es decir, $\tilde{\mathbf{A}}^- = -\tilde{\mathbf{A}}^+$ [50, 70, 75]. Por esto, también el campo pseudomagnético difiere en signo para cada valle, lo que lo hace diferente a un campo magnético real que si puede romper la simetría temporal del sistema.

¹⁸Con el doblamiento del grafeno, ocurren tres efectos principales: aumenta la distancia entre átomos de carbono, se rotan los orbitales p_z , y hay una rehibridación de los orbitales sp^2 [70]. En este caso, se ha ignorado la modificación de los parámetros de acoplamiento por los últimos dos efectos mencionados, ya que los efectos son pequeños en este caso [50].

¹⁹Dado que las deformaciones consideradas en este caso son pequeñas, omitir la conexión de espín (*spin-connection*), que garantiza la hermiticidad del Hamiltoniano, es una buena aproximación [50, 75]. Véase, por ejemplo, la referencia [136] para más detalles sobre la obtención de este Hamiltoniano.

La transformación de los vectores en el espacio no deformado del grafeno se produce mediante el tensor de deformaciones efectivo $\tilde{\underline{\varepsilon}}$, de modo que el espacio de referencia local se transforma como $\tilde{\mathbf{e}}_j(\mathbf{x}) = (\mathbb{1} - \tilde{\underline{\varepsilon}}(\mathbf{x})) \mathbf{e}_j$, donde $\mathbf{e}_{x/y}$ son los vectores unitarios en el espacio no deformado. De este modo, en términos de $\tilde{\underline{\varepsilon}}$, el potencial vectorial pseudomagnético sigue la forma [50, 74, 75, 106, 122, 136, 137, 140]

$$\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{x}) = \frac{\xi}{2} (-2\tilde{\varepsilon}_{xy}, \tilde{\varepsilon}_{yy} - \tilde{\varepsilon}_{xx}), \quad (3.35)$$

donde ξ es el índice de valle ($\xi = +1$ para \mathbf{K}^+ , $\xi = -1$ para \mathbf{K}^-). El cambio de signo del potencial vectorial con respecto a la polarización de valle se toma como ventaja para generar polarizadores de valle con grafeno deformado [75, 76], como se puede ver en la figura 3.24a. Por otro lado, debido al régimen de deformaciones pequeñas donde se asume la proporción $\delta t_{ij} \sim \beta \delta r_{ij}$, el tensor de deformaciones efectivo $\tilde{\underline{\varepsilon}}$ es proporcional a la deformación real que se le aplica en el grafeno, $\tilde{\underline{\varepsilon}} = \beta \underline{\varepsilon}$, ya que éste recoge las variaciones de los parámetros de acoplamiento. Así, la geometría efectiva de estas excitaciones electrónicas es casi idéntica a la geometría real de la deformación en la nanocinta de grafeno, pero es magnificada por el factor β . De la expresión (3.35) se sigue que el campo pseudomagnético efectivo tiene la forma en términos del tensor de deformaciones efectivo como

$$\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{x}) = \frac{\xi}{2} [\partial_x \tilde{\varepsilon}_{yy}(\mathbf{x}) - \partial_x \tilde{\varepsilon}_{xx}(\mathbf{x}) + 2\partial_y \tilde{\varepsilon}_{xy}(\mathbf{x})], \quad (3.36)$$

el cuál es perpendicular al plano del grafeno no deformado. Adicionalmente, si la deformación fuera del plano está descrita por la función de altura $h(\mathbf{x})$, el tensor de deformaciones efectivo se puede escribir en términos de dicha función y su variación direccional como

$$\tilde{\varepsilon}_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{\beta}{2} \partial_i h(\mathbf{x}) \partial_j h(\mathbf{x}), \quad (3.37)$$

y por tanto también el campo pseudomagnético (3.36) de la forma

$$\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{x}) = \frac{\xi}{2} (\beta [\partial_x h(\mathbf{x}) (\partial_{yy} h(\mathbf{x}) - \partial_{xx} h(\mathbf{x})) + 2\partial_y h(\mathbf{x}) \partial_{xy} h(\mathbf{x})]). \quad (3.38)$$

Para comenzar a estudiar los efectos en el transporte electrónico de las uniones pn en grafeno con deformaciones elásticas, primero se estudia el transporte electrónico en grafeno solamente deformado. Para ello, se considera una nanocinta de grafeno de tamaño $\{L_x, L_y\} = \{150 \text{ nm}, 100 \text{ nm}\}$ (extensión del sistema de 50 nm) en el cuál genera una deformación elástica tipo bache que sigue la función de altura

$$h(\mathbf{r}) = \frac{h_b}{1 + \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_c|}{r_b}\right)^2}, \quad (3.39)$$

donde h_b es la altura máxima de la red que se alcanza en el centro \mathbf{r}_c y r_b controla el ancho de la deformación; véase la figura 3.24g para ver un bosquejo de la nanocinta de grafeno con la deformación fuera del plano que sigue esta función de altura. Este

tipo de deformaciones se ha realizado experimentalmente usando la punta de un STM o AFM [72, 128–130] y se ha propuesto generarlas con gas presurizado [133, 134] o haciendo litografía en el sustrato [141]. En la figura 3.24a se muestra el flujo de corriente, calculado por el método de NEGF, en esta nanocinta de grafeno deformado, donde los parámetros de la deformación son $\mathbf{r}_c = (0.5L_x, 0.5L_y)$ (indicando con un punto negro), $r_b = 0.35L_y = 35$ nm (indicado este radio por el círculo rayado negro, véase la figura 3.24g para referencia) y $h_b = 0.22r_b = 7.7$ nm. Esta deformación aplicada genera un cambio de posición δr_{ij} máximo de 1.2 %, que está muy por debajo del 10 % que resiste el grafeno en una respuesta lineal [128, 142], y lo cual produce cambios máximos en los parámetros de acoplamiento δt_{ij} del 4 %²⁰. Que se considere una proporción entre la altura y el ancho de la deformación, h_b/r_b , es por el comportamiento natural de una deformación causada por una punta de microscopio electrónico. Como se observa en la figura, el haz de electrones inyectado al sistema se divide en dos haces alrededor de la deformación tipo bache al tener interacción con la curvatura y el campo pseudomagnético asociados. Como se mencionó previamente, la división de este haz de electrones se hace en referencia a la polarización de valle que tienen los electrones. Para confirmar esto, se mide la polarización de valle como lo describen Stegmann y Szpak en [75] y se resume a continuación.

La polarización de valle de un estado electrónico $|\alpha\rangle$ se puede medir mediante su proyección $P(\mathbf{k}) = |\langle\psi(\mathbf{k})|\alpha\rangle|^2$ en los eigenestados de la red del grafeno, ya que representa los estados ocupados en el espacio recíproco. Estos eigenestados se describen como²¹

$$\psi_j(\mathbf{k}) = \begin{cases} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} & \text{si } j \in \text{A}, \\ s e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_j - \delta_1)} \frac{H_{AB}(\mathbf{k})}{|H_{AB}(\mathbf{k})|} & \text{si } j \in \text{B}, \end{cases} \quad (3.40)$$

donde s es el índice de banda, δ_1 es el vector que une a la subred A con la subred B (figura 3.3a) y H_{AB} es la expresión (3.7). Dentro del formalismo NEGF, esta proyección se transforma como

$$P_i(\mathbf{k}) = \langle\psi(\mathbf{k})|G\Sigma_S^{\text{in}}G^\dagger|\psi(\mathbf{k})\rangle_{\mathcal{R}_i}, \quad (3.41)$$

donde la proyección se calcula sobre una zona finita en el espacio real del sistema \mathcal{R}_i (véanse por ejemplo los rectángulos sombreados grises de las figuras 3.8a-b). Esta densidad espectral $P_i(\mathbf{k})$ es integrada en una región hexagonal \mathcal{K}^\pm alrededor de los valles \mathbf{K}^\pm (véase por ejemplo el hexágono pequeño gris alrededor del punto \mathbf{K}^+ en la figura 3.24f),

$$\mathcal{P}_i^\pm = \int_{\mathbf{k} \in \mathcal{K}^\pm} d^2k P_i(\mathbf{k}). \quad (3.42)$$

²⁰La elección de la proporción $h_b/r_b = 0.22$ también se rige porque tiene la mayor eficiencia para dividir la corriente por polarización de valle [75], por lo que se considerará a partir de ahora esta misma proporción en todas las deformaciones tipo bache que se mencionen.

²¹Se usa por simplicidad los eigenestados del Hamiltoniano del grafeno de amarre fuerte (3.4), ya que la proyección con los eigenestados del Hamiltoniano (3.34) para grafeno deformado dan resultados cualitativamente idénticos [75].

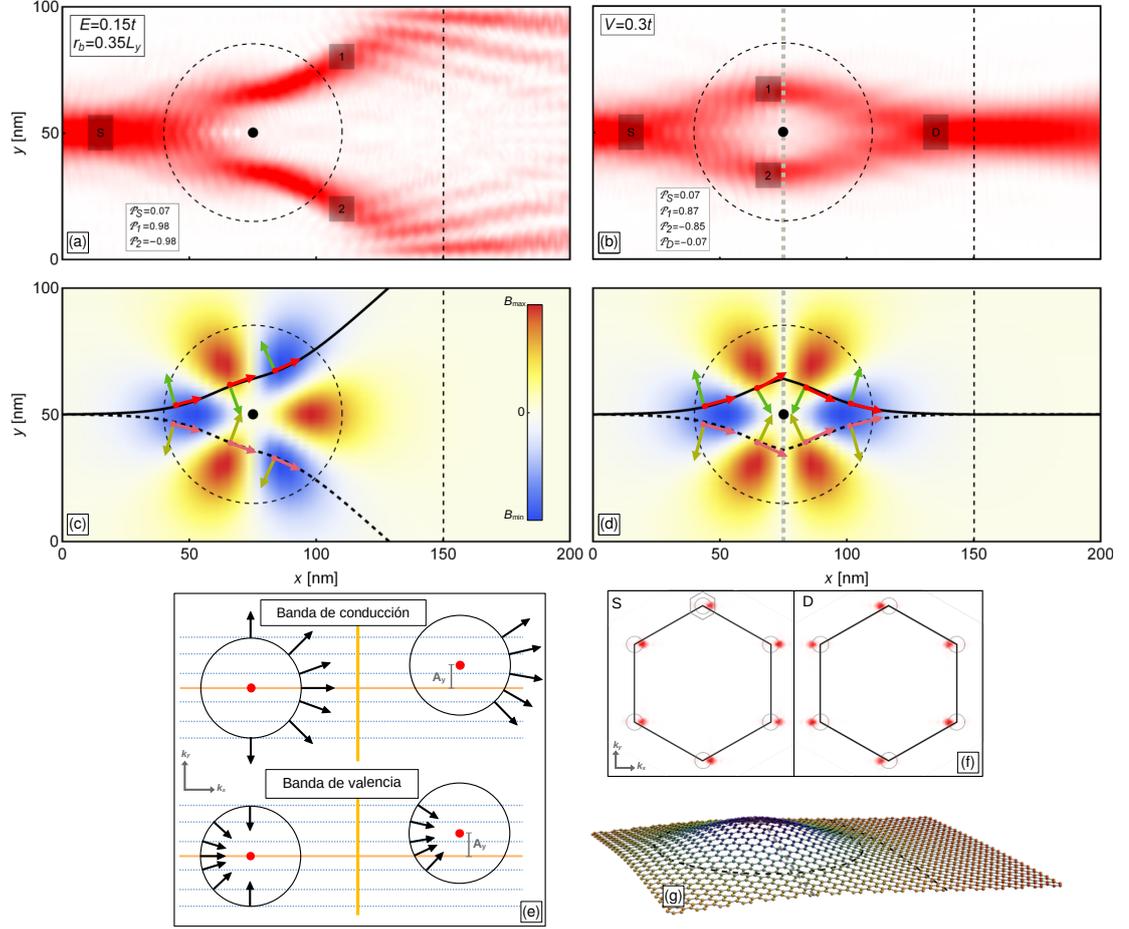


Figura 3.24: Flujo de corriente en una nanocinta de grafeno con una deformación elástica tipo bache sin (a) y con (b) una unión pn abrupta; el círculo rayado negro y el punto negro indican el radio y el centro de la deformación (r_b y \mathbf{r}_c en ec. (3.39)). Se observa que la deformación elástica divide el haz de electrones en polarización \mathbf{K}^+ hacia arriba y \mathbf{K}^- hacia abajo (véase la polarización \mathcal{P} de las regiones rectangulares grises), y que la unión pn tiene el efecto de reenfozar y colimar dicho haz. En (c) y (d) se muestra el mapa del campo pseudomagnético generado por la deformación elástica correspondiente al valle \mathbf{K}^+ , así como un bosquejo de las trayectorias que siguen los electrones para el caso (a) y (b), respectivamente. La trayectoria sólida (rayada) corresponde a electrones con polarización \mathbf{K}^+ (\mathbf{K}^-). Las flechas rojas indican la velocidad de grupo de los electrones y las verdes la fuerza que genera la desviación de la trayectoria. (e) Esquema de la velocidad de grupo para la banda de valencia y conducción en ausencia (izquierda) y presencia (derecha) del campo pseudomagnético. Se muestra que cuando la componente A_y del campo tiene el mismo signo, la desviación producida es distinta para cada banda (de conducción hacia abajo y de valencia hacia arriba). (f) Proyección de $P_i(\mathbf{k})$ en la región gris \mathcal{R}_S y \mathcal{R}_D de (b). Se observa que en ambos casos la corriente está compuesta de estados en los seis valles (no polarizada) y que el momento de los electrones en la región p (derecha) es opuesto al de los electrones en la región n (izquierda), donde se inyecta el haz; los círculos grises tiene radio \mathbf{k}_0 . (g) Bosquejo de una nanocinta de grafeno con una deformación elástica tipo bache de $r_b = 0.35L_y$; se indica la altura de los sitios de la red por color.

Así, la polarización de valle está dada por

$$\mathcal{P}_i = \frac{\mathcal{P}_i^+ - \mathcal{P}_i^-}{\mathcal{P}_i^+ + \mathcal{P}_i^-}. \quad (3.43)$$

De este modo, si $\mathcal{P}_i = \pm 1$ indica que los electrones están localizados exclusivamente en los valles \mathbf{K}^\pm (figura 3.3b) y por tanto están completamente polarizados; por otro lado, si $\mathcal{P}_i = 0$ indica que los electrones están localizados en todos los valles y no están polarizados.

Retomando la discusión del transporte electrónico en la figura 3.24a, se calcula la polarización de valle \mathcal{P}_i en tres regiones rectangulares que se indican por rectángulos sombreados grises (valores en la figura). En la región \mathcal{R}_S se calcula la polarización que tiene el haz de electrones cuando se inyecta al sistema, resultando una polarización $\mathcal{P}_S \cong 0$, refiriendo a que los electrones se encuentran en los seis valles y por tanto no tienen carecen de polarización de valle, lo que es congruente con la inyección del haz que se hace con una mezcla de los valles en la misma proporción, con $c^\pm = 0.5$ en (3.12). Al considerar las regiones $\mathcal{R}_{1/2}$ que señalan cada uno de los dos haces de electrones, se observa que la polarización para el haz que va hacia arriba tiene $\mathcal{P}_1 \cong 1$ indicando que los electrones de este haz están polarizados en los valles \mathbf{K}^+ , mientras que para el haz que va hacia abajo $\mathcal{P}_2 \cong -1$ y por tanto los electrones ahí están polarizados en los valles \mathbf{K}^- . Esto evidencia que el grafeno con deformaciones tipo bache pueden ser utilizadas como polarizadores de valle en nanoelectrónica. El hecho que esta deformación elástica divida a la corriente por polarización de valle, y que ésta rodee a la deformación, está fundamentada en que el campo pseudomagnético actúa con el signo contrario a cada valle (ya que el campo vectorial $\tilde{\mathbf{A}}$ desplaza a los valles no equivalentes \mathbf{K}^\pm en dirección opuesta) y que también tiene la forma (3.38). En la figura 3.24c se presenta la imagen del campo pseudomagnético $\tilde{\mathbf{B}}$ para el valle \mathbf{K}^+ ($\xi = +1$)²² en todo el sistema, donde se observa que sólo se concentra en la deformación y que tiene lóbulos alternantes donde el campo va hacia adentro (azul) y hacia afuera (naranja) del plano del grafeno. Adicionalmente, se esboza con una curva sólida (rayada) negra la trayectoria que sigue un electrón con polarización \mathbf{K}^+ (\mathbf{K}^-) inyectado en el centro del haz²³. La forma de esta trayectoria está regida por la desviación que genera la fuerza magnética $\mathbf{v}' \times \tilde{\mathbf{B}}$, \mathbf{v}' la velocidad de grupo; para evidenciar esto, con flechas rojas se indica la velocidad de grupo del electrón y con flechas verdes la fuerza magnética que sufre el electrón en cada punto señalado (nótese la dirección de $\tilde{\mathbf{B}}$ en cada punto, para cada valle \mathbf{K}^\pm).

Para exhibir el efecto de las uniones pn en el sistema anterior, se genera una unión pn abrupta simétrica, donde su interfaz (línea gris rayada) pasa por el centro de la deformación. En la figura 3.24b se muestra el flujo de corriente para este último sistema, donde se observa que el haz de electrones inyectado por la izquierda está reenfocado en

²²La imagen del campo pseudomagnético sólo cambia de signo (se invierte el color de los lóbulos) para el valle \mathbf{K}^- ($\xi = -1$), de acuerdo a la ecuación (3.38).

²³Esta trayectoria se obtiene de la expresión (3.30), considerando $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}(\tau = 0) = (0, 0.5L_y)$, $\mathbf{v}_0 = \mathbf{v}(\tau = 0) = \tilde{\mathbf{g}}(\mathbf{k}_0 - \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{x}_0))$, $\mathbf{k}_0 = \frac{2E}{3a_0t}(1, 0)$ y $V(\mathbf{x}) = 0$.

el borde de simetría, además de estar colimado, como se ve en la extensión del sistema. Esto indica que la unión pn en el grafeno con la deformación tipo bache reconstruye el haz de electrones, además de que vuelve a mezclar los electrones polarizados, como se observa al medir la polarización de valle en las regiones $\mathcal{R}_{S/D}$ donde $\mathcal{P}_{S/D} \approx 0$. Este resultado de adicionar la unión pn es consecuencia de que en la interfaz de la unión los electrones cambian su ángulo como $\theta_{\text{tr}} = -\theta_{\text{in}}$ (ec. 3.18) por la refracción negativa y que el campo pseudomagnético desvía su trayectoria nuevamente por la fuerza magnética (figura 3.24d).

Es de importancia notar que el campo pseudomagnético actúa de forma contraria para los electrones que se encuentran en la banda de conducción (región n) y en la de valencia (región p). Esto se muestra claramente en el esquema de la figura 3.24e, donde se traza en el espacio recíproco el efecto del campo vectorial $\tilde{\mathbf{A}}$ en el valle \mathbf{K}^+ . En la figura, se muestra un corte del cono de Dirac (círculo) y las velocidades de grupo de electrones (flechas negras) en la banda de conducción y en la de valencia, en grafeno sin (izquierda) y con deformación elástica (derecha), y donde se indica como se desplaza el cono de Dirac por la componente $A_y > 0$ hacia arriba²⁴. Se observa que el desplazamiento del cono de Dirac hace que el cambio de dirección de propagación de los electrones sea hacia abajo en el caso de la banda de conducción y hacia arriba para los electrones en la banda de valencia (tómense como guía las línea rayadas azules); aún más, el cambio de dirección es simétrico (véase por ejemplo la flecha de la línea rosada). Esto da muestra de que la fuerza magnética es en dirección opuesta para los electrones en la banda de valencia y en la banda de conducción, lo que puede inferir a que la dirección del campo pseudomagnético también dependa del índice de banda s ($s = +1$ para la banda de conducción y $s = -1$ para la de valencia), pues la velocidad de grupo no tiene cambio por el cambio de banda, de modo que ahora el campo pseudomagnético se escribe como $\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{x}) = s\tilde{\mathbf{B}}'(\mathbf{x})$, con $\tilde{\mathbf{B}}'$ como en (3.38). En la figura 3.24d se muestra la imagen del campo pseudomagnético $\tilde{\mathbf{B}}$, donde se observa una simetría respecto a la línea de interfaz, y también se esboza la trayectoria de un electrón²⁵ como en la figura 3.24c. En las trayectorias se puede ver que el cambio de momento por la refracción negativa, la simetría del pseudocampo (nótese la dirección de la fuerza magnética) y que éste actúa con signo opuesto para cada valle hacen que el haz de electrones se reconstruya. En la figura 3.24f se muestra la proyección de $P_i(\mathbf{k})$ (ec. (3.41)) para las regiones $\mathcal{R}_{S/D}$, donde se magnifica en 2.5 las cantidades alrededor de los seis valles. Esta figura evidencia que efectivamente los electrones del haz en estas regiones no están polarizados, pues se concentran en los seis valles de la zona de Brillouin. Además, se comprueba que el momento de los electrones en la banda de conducción va hacia la derecha (dirección de inyección), mientras que en la banda de valencia el momento es

²⁴Como el desplazamiento con $A_y > 0$ es hacia arriba para el valle \mathbf{K}^+ , entonces dicho desplazamiento sería hacia abajo para el valle \mathbf{K}^- (conservando el valor positivo de la componente).

²⁵Para este caso, la trayectoria en la región p se calcula usando la simetría de la unión pn y la simetría de inversión temporal debido a que el potencial electrostático externo $V(x, y) = \theta(x - x_{\text{int}})$ tiene una discontinuidad (x_{int} posición de la interfaz), por lo que se considera $\mathbf{x}_0 = (L_x, 0.5L_y)$ y $\mathbf{v}_0 = \tilde{\mathbf{g}}(\mathbf{k}_0 - \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{x}_0))$, $\mathbf{k}_0 = \frac{2(E-V)}{3a_0t}(-1, 0)$ en la ecuación (3.30).

hacia la izquierda, siendo opuesto a la dirección de propagación, lo cual confirma que son electrones y no huecos (ausencia de electrones) [13].

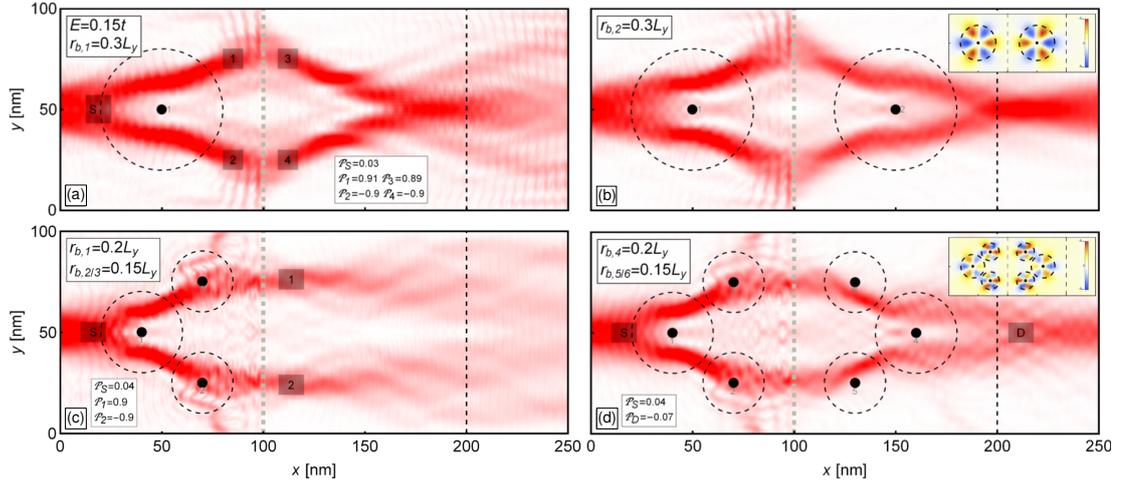


Figura 3.25: Flujo de corriente en una unión pn simétrica con deformaciones elásticas tipo bache sólo en la región n (a),(c) y en ambas regiones (b),(d). Las deformaciones elásticas en la región p son reflejadas a las de la región n respecto a la interfaz (línea rayada gris). Para el caso de una deformación tipo bache, (a), se observa que el haz de electrones se enfoca antes del borde de simetría y después diverge, pero cuando se tiene una segunda deformación simétrica, (b), el haz se reconstruye mayormente debido a la simetría del campo pseudomagnético generado (ver recuadro con la imagen del pseudocampo). En la configuración con tres baches en la primera región de la unión, se producen dos haces paralelos con distinta polarización de valle, pero al generar las mismas deformaciones reflejadas en la segunda región se reconstruye el haz.

El caso anterior ha sido cuando la interfaz de la unión pn pasa por la deformación elástica. Para estudiar cuando estas deformaciones se hacen sólo en una región de la unión, se considera un sistema un poco más largo ($L_x = 200$ nm) y deformaciones más angostas. En la figura 3.25a se muestra el flujo de corriente en una unión pn donde hay una deformación tipo bache en el centro de la región n ($\mathbf{r}_{c,1} = (0.25L_x, 0.5L_y)$) de tamaño $r_{b,1} = 0.3L_y = 30$ nm (recordar que siempre $h_b/r_b = 0.22$). Aquí se observa como el haz de electrones inyectado no polarizado ($\mathcal{P}_S \cong 0$) al sistema se divide en dos haces con distinta polarización de valle ($\mathcal{P}_{1/2} \cong \pm 1$), pues al igual que el caso de la figura 3.24a, la deformación elástica actúa como polarizador de valle. Al llegar los haces a la interfaz, los haces se refractan negativamente, teniendo como ángulo inicial en la región n el mismo ángulo de incidencia a la interfaz (ec. 3.18), lo que genera que dichos haces se crucen en un punto previo al borde de simetría y se sigan para después generar un haz que diverge fuertemente, como se puede ver en la extensión del sistema. Con las mediciones de polarización de valle en las regiones $\mathcal{R}_{1/3}$ y $\mathcal{R}_{2/4}$ se exhibe que el cambio de banda de los electrones al pasar a través de la interfaz de la unión pn no modifica su polarización de valle. Si se produce una segunda deformación en la región p

que sea reflejada a la primera respecto a la interfaz de la unión ($\mathbf{r}_{c,2} = (0.75L_x, 0.5L_y)$, $r_{b,2} = r_{b,1}$), entonces se expone en la figura 3.25b que el haz de electrones en el borde de simetría tiene un tamaño muy similar al de inyección y que la divergencia después de este borde es mínima en comparación con el caso de sólo una deformación. Esta reconstrucción del haz de electrones por este sistema simétrico está dada por la reflexión negativa de la unión pn y que una vez más el campo pseudomagnético generado por las dos deformaciones (imagen en el recuadro superior de la figura) es simétrico respecto a la interfaz de la unión, pues se tiene que la dirección de éste (hacia afuera o hacia adentro del plano) depende también del índice de banda; para este caso (y en los siguientes), la función de altura para la deformación total del sistema es la suma de ambas deformaciones individuales, es decir, $h(\mathbf{r}) = h_1(\mathbf{r}) + h_2(\mathbf{r})$, donde $h_{1/2}$ es la función (3.39) para la deformación en la región n/p .

Ahora se considera una configuración de tres deformaciones tipo bache en la región n , donde la primera se tiene con $\mathbf{r}_{c,1} = (0.2L_x, 0.5L_y)$ y $r_{b,1} = 0.2L_y$, y las dos restantes tienen el mismo tamaño $r_{b,2/3} = 0.15L_y$ y están alineadas verticalmente como $\mathbf{r}_{c,2/3} = (0.35L_x, 0.25/0.75L_y)$. Se observa en la figura 3.25c que el haz de electrones inyectado no polarizado se divide en dos haces paralelos que tienen distinta polarización de valle. Considerando a las deformaciones tipo bache como polarizadores de valle, la primera deformación hace la división del haz en polarización de valle, y las otras dos restantes sólo llevan a que dichos haces incidan de forma normal a la interfaz de la unión (ya que sólo afectan a los electrones con una sola polarización de valle), por lo que cualitativamente no cambian su trayectoria y se propagan sufriendo difracción por la naturaleza misma de los electrones (véase figura 3.7a), ya que después de la interfaz la energía efectiva de los electrones ($E_{ef} = -0.15t$) no cambia. Este configuración de deformaciones elásticas puede considerarse por si sola para un dispositivo en grafeno que produce dos haces paralelos y colimados con diferente polarización de valle. Al igual que en el caso anterior, en la figura 3.25d se produce en la región p de la unión deformaciones reflejadas respecto a la interfaz, lo que genera que los dos haces de electrones polarizados se vuelva a mezclar de forma que se reenfoque en el borde de simetría ya como un único haz y que después se colime significativamente. Nótese que la unión pn también despolariza los haces ya polarizados al mezclarlos (en la figura $\mathcal{P}_{S/D} \cong 0$). Una vez más, esta reconstrucción del haz de electrones es debido a que la simetría de las deformaciones genera una simetría en el campo pseudomagnético (recuadro superior derecho) y por tanto una alta simetría en el sistema completo.

En los casos anteriores se ha mostrado como las uniones pn actúan en grafeno cuando se tiene deformaciones elásticas tipo bache que se pueden generar de forma conveniente y localizada mediante puntas de microscopio electrónico, gas presurizado o litografía en el sustrato. Adicional a esto, es común que las monocapas de grafeno resulten arrugadas, perdiendo la característica de que todos los átomos se encuentren en un mismo plano. Por ello, a continuación se estudiará como es el transporte electrónico en uniones pn de grafeno arrugado. Para dar paso a la investigación de estos sistemas,

por simplicidad se utilizarán deformaciones elásticas fuera del plano tipo bache, con tamaños y posiciones aleatorias, como una aproximación para emular que la nanocinta de grafeno es arrugada y que pueden ser producidas por el método de litografía en el sustrato [141].

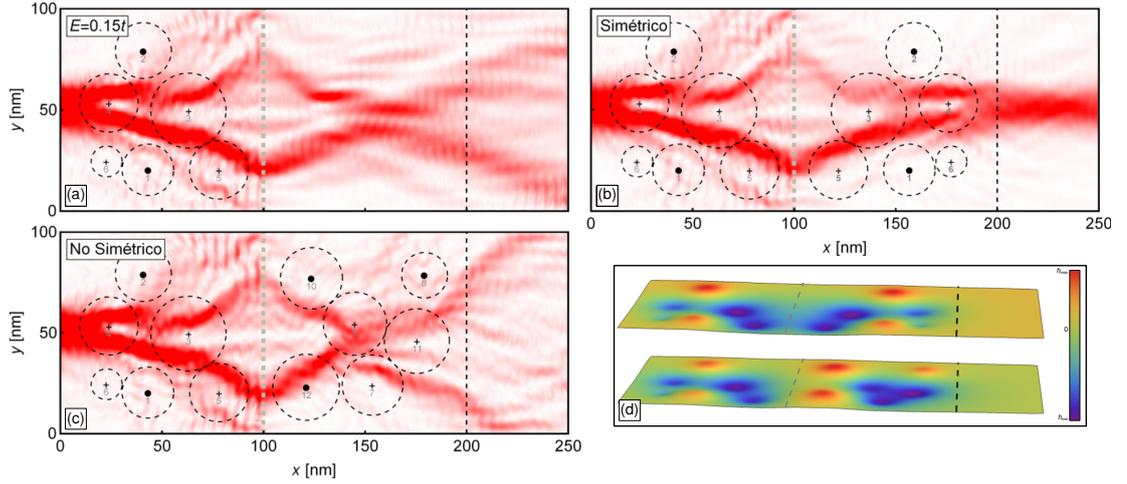


Figura 3.26: Transporte electrónico una unión pn de grafeno con arrugas. En (a) el grafeno sólo está arrugado en la región n ; en (b) y (c) también tiene arrugas en la región p , donde las arrugas tienen y carecen de simetría respecto a la interfaz de la unión, respectivamente. Sólo en el caso donde las arrugas son simétricas en la unión pn el haz inyectado se colima. (d) Grafica 3D que esboza el grafeno con arrugas en ambas regiones para el caso simétrico (superior) y no simétrico (inferior). La posición vertical de los átomos en la red se indica por color.

En la figura 3.26a se muestra el flujo de corriente de un haz inyectado, desde el borde izquierdo, en una nanocinta de grafeno arrugada con una unión pn , donde las arrugas quedan solamente en la región n . Como se previó, las arrugas son generadas mediante deformaciones elásticas tipo bache, de modo que la posición, tamaño y orientación de la deformación (se indica con un punto que la deformación sale del plano, como en la figura 3.24g, y con una cruz que entra al plano) es aleatoria. Se observa que debido a este tipo de deformaciones, una vez más el haz de electrones se divide mayormente en dos haces, aunque el flujo de corriente es más caótico que antes. Debido a la presencia de la unión pn , en la interfaz la corriente se enfoca en una zona en el centro de la región p para después seguir de forma divergente, pues la refracción negativa genera este punto de enfoque. Al considerar que la región p de la unión también está arrugada, sólo en el caso de que las arrugas sean completamente simétricas a las de la región n ²⁶, el haz de electrones se enfoca en el borde de simetría y se colima robustamente, como se observa en la figura 3.26b. Si esta simetría en las arrugas no se conserva, entonces el flujo de corriente se vuelve caótico sin importar la presencia de la unión pn , como se puede ver

²⁶Las deformaciones elásticas fuera del plano para la región p cuando es el caso simétrico tienen el mismo tamaño y dirección que en la región n , la posición es reflejada respecto a la interfaz.

en la figura 3.26c. Este resultado indica que es necesaria la alta simetría en el sistema para que la unión pn pueda reconstruir el haz de electrones.

En la figura 3.26d se puede ver un esbozo de como es la nanocinta de grafeno arrugada para el caso simétrico (superior) y no simétrico (inferior); la altura de los átomos en la nanocinta se indica por color, donde azul indica que está por debajo del plano y azul que está por encima de éste.

3.3.3. Conclusiones

En esta sección se presentaron los estudios del transporte electrónico en uniones pn simétricas con interfaz abrupta bajo dos condiciones: con regiones de desorden dentro de una región de la unión y con deformaciones elásticas fuera del plano, que mayormente fueron descritas por deformaciones tipo bache (ec.(3.39)). Se estudio el flujo de corriente en estos sistemas, donde se observo su comportamiento al pasar a través de la interfaz de la unión pn y después del borde de simetría.

Se mostró primero como la unión pn abrupta sin modificaciones actúa como una lente de Veselago (figura 3.20a), reconstruyendo el haz de electrones inyectado, es decir, reenfocándolo en el borde de simetría y colimándolo después de este, en la extensión del sistema.

Para el caso en que se consideraron regiones de desorden dentro de la región n y la región p , se mostró que la unión pn tiene el efecto de reconstruir el haz de electrones si las regiones de desorden tienen una simetría de reflexión espacial respecto a la interfaz y poseen la misma amplitud de desorden, sin importar que este potencial de desorden no tenga una simetría espacial también; véase figura 3.20. Además, esta reconstrucción del haz de electrones es algo robusta incluso si se rompe la simetría en dirección vertical (figura 3.23).

Centrando el estudio en grafeno con deformaciones elásticas fuera del plano, con medidas de polarización de valle, se presentó como la deformación por si sola es un polarizador de valle debido al campo pseudomagnético que se genera, y que la unión pn vuelve a reconstruir el haz de electrones una vez que pasa a través de su interfaz además de mezclar nuevamente los electrones polarizados por valle; para esto, la interfaz de la unión debe pasar por el centro de la deformación. La reconstrucción del haz de electrones viene dada por el comportamiento de este campo pseudomagnético respecto a la banda en donde se mueven los electrones; véase figura 3.24. Por esto mismo, es posible que hacer esta reconstrucción del haz incluso si se tienen múltiples deformaciones elásticas, considerando dichas deformaciones sean reflejadas espacialmente respecto a la interfaz de la unión (figura 3.25). Adicional a esto, se introdujo la idea de un dispositivo nanoelectrónico con grafeno para generar haces paralelos de electrones polarizados en valle (figura 3.25c).

Finalmente, se consideró el caso de grafeno con arrugas (figura 3.26) y se observó que la unión pn reconstruye el haz de electrones si se tiene una simetría espacial estas arrugas respecto a la interfaz.

Con los resultados anteriores se presenta la prueba de concepto de que las uniones

3.3 Efecto de las uniones pn en grafeno con desorden y deformaciones elásticas

pn abruptas pueden ayudar a disminuir u omitir los efectos de algunos defectos en el grafeno, como el desorden o deformaciones elásticas, si se consigue una simetría de reflexión espacial respecto a su interfaz de estos defectos en grafeno. Además, se mostró que si los defectos tienen la misma magnitud (amplitud de desorden o tamaño de la deformación) en ambas regiones puede ser suficiente.

Conclusiones Generales

El objetivo principal de esta tesis fue estudiar el transporte electrónico en uniones pn de grafeno, ofreciendo trayectorias semiclásicas como herramienta para describir el flujo de corriente de electrones y mostrando los efectos de las uniones pn rectas abruptas en grafeno con desorden o deformaciones elásticas.

Para ellos, se estudió el flujo de corriente de electrones a través de los sistemas mediante el método de funciones de Green fuera de equilibrio, y utilizando el modelo de amarre fuerte a primeros vecinos para el Hamiltoniano que describe el sistema completo. Se trabajó a bajas energías, por lo que se permitió una descripción de Dirac de los electrones en el transporte. En la generación de las uniones pn estudiadas, se consideró el método de compuertas de voltaje (fig. 3.5) que no abre brecha energética y sólo desplaza los conos de Dirac en las regiones n y p de la unión.

En un primer bloque de resultados (sec. 3.2), se estudiaron las uniones pn rectas y circulares, con interfaz suave y abrupta. Se compararon el flujo de corriente del transporte cuántico con trayectorias semiclásicas que vienen de una descripción de la óptica geométrica de gradiente de índice. Para obtener estas trayectorias ópticas en uniones rectas (ec. (3.20)) y circulares (ec. (3.22)), se hizo la definición de un índice de refracción efectivo (ec. (3.17)). Con las uniones rectas se validó la Ley de Snell generalizada para electrones, además de evidenciar que para las uniones con interfaz suave emerge una zona energéticamente prohibida por la que los electrones tienen que hacer tunelamiento a través de ellas (figs. 3.7-3.9). También, para estas uniones las trayectorias semiclásicas tuvieron un buen acuerdo con el flujo de corriente, al igual que con las uniones circulares con interfaz abrupta (fig. 3.11). Con las uniones circulares suaves es donde se tuvo una variación más evidente del índice de refracción, aludiendo al nombre de óptica electrónica de índice de gradiente. En estas uniones, se observó una fuerte interferencia en su interior (región p), lo que permitió un buen acuerdo de las trayectorias semiclásicas con la corriente sólo en su exterior (fig. 3.12). La interferencia en el interior ayudó a generar en ciertas condiciones WGM (fig. 3.13). Sin embargo, en las uniones circulares nn' y pp' las trayectorias si describieron muy bien el flujo de corriente (fig.

3.15), además de que éstas se pueden usar como dispositivos similares a los ópticos en nanoelectrónica. Con la idea del índice de refracción variante, se mostró que es posible obtener los mismos efectos de lentes GRIN en grafeno (fig. 3.16) con el potencial electrostático externo adecuado. Finalmente, se presentó que las trayectorias ópticas propuestas tienen un alcance mayor a las geodésicas cuando el índice de refracción es negativo.

En la última sección de resultados (sec. 3.3), se estudiaron los efectos que tienen las uniones pn simétricas con interfaz abrupta en grafeno con regiones de desorden y deformaciones elásticas tipo bache. Se realizó una extensión al sistema a partir de un borde de simetría, para ver como se comportaba el haz de electrones en esta zona. Se presentó que estas uniones por si solas reconstruyen el haz de electrones inyectado como lente de Veselago (fig. 3.20a). Además, cuando se tienen zonas de desorden en la nanocinta de grafeno, las uniones reenfocaron al haz electrones inyectado en el borde de simetría y lo colimaron mayormente después de éste bajo ciertas condiciones: cuando las zonas de desorden tienen simetría de reflexión espacial respecto a la interfaz de la unión y tienen la misma amplitud de desorden (figs. 3.20-3.21). Además, se exhibió que este efecto es robusto bajo el rompimiento de la simetría vertical (fig. 3.23). Cuando se generaron deformaciones elásticas fuera del plano, se observó que por si solas estas deformaciones dividen a los haces de electrones por polarización de valle (figs. 3.24a, 3.25a,c). Sin embargo, al conservar la simetría de reflexión espacial en las deformaciones elásticas, las uniones nuevamente hicieron la reconstrucción del haz de electrones al igual que en el caso del desorden, además de volver a mezclar los haces ya polarizados de valle (figs. 3.24-3.25). Finalmente, se expuso como en grafeno corrugado, estas uniones hacen una reconstrucción del haz cuando se preserva la simetría de reflexión espacial. Con estos resultados, se mostraron las condiciones en las cuales estas uniones pn pueden revertir el efecto que tienen el desorden o las deformaciones elásticas en el flujo de corriente.

A lo largo de esta tesis, se presentaron propuestas de dispositivos con uniones pn , como lo son generadores de haces paralelos (figs. 3.9a,b), lentes de Veselago circulares (figs. 3.11-3.12), generadores de WGM (fig. 3.13), divisores de haz y lentes convergentes (fig. 3.15), lentes GRIN (fig. 3.16) y polarizadores de valle (fig. 3.25c). Con esto se ofrecen pruebas de concepto para considerar en el desarrollo de dispositivos en la nanoelectrónica. Adicionalmente, se presentaron a las trayectorias semiclásicas puedan ser tomadas como una herramienta barata para cálculos del flujo de corriente en estos sistemas, cuando la interferencia no sea importante.

Se espera que con esta tesis se haya contribuido en una pequeña parte al conocimiento del transporte cuántico a través de las uniones pn de grafeno. Sin embargo, algunas de estas ideas se pueden extender para mejorar el entendimiento del transporte en estos sistemas. Considerando que las uniones circulares suaves se producen mediante una punta de un microscopio electrónico, esta misma punta puede generar una deformación elástica y ver como se suma el efecto del potencial de dopaje con el campo

pseudomagnético producido por la deformación. También, se puede estudiar el efecto de las uniones pn abruptas con distinto tipo de desorden, como dislocaciones o defectos estructurales, así como en grafeno ondulado.

Referencias

- [1] P. R. Wallace. The Band Theory of Graphite. *Physical Review*, 71(9):622–634, may 1947. DOI: 10.1103/physrev.71.622. 1
- [2] K. S. Novoselov. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, 306(5696):666–669, oct 2004. DOI: 10.1126/science.1102896. 1, 14
- [3] 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, 15, 23, 29
- [4] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene. *Nature Physics*, 2(9):620–625, aug 2006. DOI: 10.1038/nphys384. 45
- [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, 15, 23, 24, 29, 45
- [6] J. Cserti, A. Pályi, and C. Péterfalvi. Caustics due to a Negative Refractive Index in Circular Graphene p-n Junctions. *Physical Review Letters*, 99(24), dec 2007. DOI: 10.1103/physrevlett.99.246801. 33, 34
- [7] J. L. Garcia-Pomar, A. Cortijo, and M. Nieto-Vesperinas. Fully Valley-Polarized Electron Beams in Graphene. *Physical Review Letters*, 100(23), jun 2008. DOI: 10.1103/physrevlett.100.236801. 1, 15, 29, 46
- [8] 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, aug 2008. DOI: 10.1021/nl801752r. 1, 15
- [9] A. F. Young and P. Kim. Quantum interference and Klein tunnelling in graphene heterojunctions. *Nature Physics*, 5(3):222–226, feb 2009. DOI: 10.1038/nphys1198. 23, 29, 45

-
- [10] J. Cayssol, B. Huard, and D. Goldhaber-Gordon. Contact resistance and shot noise in graphene transistors. *Physical Review B*, 79(7), feb 2009. DOI: 10.1103/physrevb.79.075428. 1, 15, 29
- [11] T. Low, S. Hong, J. Appenzeller, S. Datta, and M. S. Lundstrom. Conductance Asymmetry of Graphene p-n Junction. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 56(6):1292–1299, jun 2009. DOI: 10.1109/ted.2009.2017646. 52
- [12] C. Péterfalvi, A. Pályi, and J. Cserti. Electron flow in circular n-p junctions of bilayer graphene. *Physical Review B*, 80(7), aug 2009. DOI: 10.1103/physrevb.80.075416. 1, 15, 34
- [13] P. E. Allain and J. N. 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. 21, 24, 29, 45, 59
- [14] R. L. Heinisch, F. X. Bronold, and H. Fehske. Mie scattering analog in graphene: Lensing, particle confinement, and depletion of Klein tunneling. *Physical Review B*, 87(15), apr 2013. DOI: 10.1103/physrevb.87.155409. 1, 15, 16, 34
- [15] B. Liao, M. Zebarjadi, K. Esfarjani, and G. Chen. Isotropic and energy-selective electron cloaks on graphene. *Physical Review B*, 88(15), oct 2013. DOI: 10.1103/physrevb.88.155432. 21
- [16] N. Agrawal, S. Ghosh, and M. Sharma. Scattering of massless Dirac fermions in circular p-n junctions with and without magnetic field. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 26(15):155301, mar 2014. DOI: 10.1088/0953-8984/26/15/155301. 1, 15, 34
- [17] J.-S. Wu and M. M. Fogler. Scattering of two-dimensional massless Dirac electrons by a circular potential barrier. *Physical Review B*, 90(23), dec 2014. DOI: 10.1103/physrevb.90.235402. 15, 16, 36
- [18] Q. Wilmar, S. Berrada, D. Torrin, V. H. Nguyen, G. Fève, J.-M. Berroir, P. Dollfus, and B. Plaçais. A Klein-tunneling transistor with ballistic graphene. *2D Materials*, 1(1):011006, apr 2014. DOI: 10.1088/2053-1583/1/1/011006. 1, 15, 45
- [19] L. Cohnitz, A. D. Martino, W. Häusler, and R. Egger. Chiral interface states in graphene p-n junctions. *Physical Review B*, 94(16), oct 2016. DOI: 10.1103/physrevb.94.165443. 15, 29
- [20] P. Bøggild, J. M. Caridad, C. Stampfer, G. Calogero, N. R. Papior, and M. Brandbyge. A two-dimensional Dirac fermion microscope. *Nature Communications*, 8(1), jun 2017. DOI: 10.1038/ncomms15783. 1, 15, 29
- [21] 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, 15
-

-
- [22] B. Huard, J. A. Sulpizio, N. Stander, K. Todd, B. Yang, and D. Goldhaber-Gordon. Transport Measurements Across a Tunable Potential Barrier in Graphene. *Physical Review Letters*, 98(23), jun 2007. DOI: 10.1103/physrevlett.98.236803. 1, 15, 21
- [23] N. Stander, B. Huard, and D. Goldhaber-Gordon. Evidence for Klein Tunneling in Graphene p-n Junctions. *Physical Review Letters*, 102(2), jan 2009. DOI: 10.1103/physrevlett.102.026807. 29
- [24] 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, 15, 21
- [25] R. N. Sajjad and A. W. Ghosh. High efficiency switching using graphene based electron “optics”. *Applied Physics Letters*, 99(12):123101, sep 2011. DOI: 10.1063/1.3640224. 1, 15, 29
- [26] R. N. Sajjad, S. Sutar, J. U. Lee, and A. W. Ghosh. Manifestation of chiral tunneling at a tilted graphenep-njunction. *Physical Review B*, 86(15), oct 2012. DOI: 10.1103/physrevb.86.155412.
- [27] S. Sutar, E. S. Comfort, J. Liu, T. Taniguchi, K. Watanabe, and J. U. Lee. Angle-Dependent Carrier Transmission in Graphene p–n Junctions. *Nano Letters*, 12(9):4460–4464, aug 2012. DOI: 10.1021/nl3011897.
- [28] 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. 21, 23, 24, 29, 45
- [29] P. Rickhaus, P. Makk, K. Richter, and C. Schönenberger. Gate tuneable beamsplitter in ballistic graphene. *Applied Physics Letters*, 107(25):251901, dec 2015. DOI: 10.1063/1.4938073.
- [30] Y. Zhao, J. Wyrick, F. D. Natterer, J. F. Rodriguez-Nieva, C. Lewandowski, K. Watanabe, T. Taniguchi, L. S. Levitov, N. B. Zhitenev, and J. A. Stroscio. Creating and probing electron whispering-gallery modes in graphene. *Science*, 348(6235):672–675, may 2015. DOI: 10.1126/science.aaa7469. 16, 23, 36, 37
- [31] 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, sep 2016. DOI: 10.1126/science.aaf5481. 21, 22, 23, 29, 45
- [32] K.-K. Bai, J.-B. Qiao, H. Jiang, H. Liu, and L. He. Massless Dirac fermions trapping in a quasi-one-dimensional npn junction of a continuous graphene monolayer. *Physical Review B*, 95(20), may 2017. DOI: 10.1103/physrevb.95.201406.
-

-
- [33] J. Hu, A. F. Rigosi, M. Kruskopf, Y. Yang, B.-Y. Wu, J. Tian, A. R. Panna, H.-Y. Lee, S. U. Payagala, G. R. Jones, M. E. Kraft, D. G. Jarrett, K. Watanabe, T. Taniguchi, R. E. Elmquist, and D. B. Newell. Towards epitaxial graphene p-n junctions as electrically programmable quantum resistance standards. *Scientific Reports*, 8(1), oct 2018. DOI: 10.1038/s41598-018-33466-z. 21, 29
- [34] H. Graef, Q. Wilmart, M. Rosticher, D. Mele, L. Banszerus, C. Stampfer, T. Taniguchi, K. Watanabe, J.-M. Berroir, E. Bocquillon, G. Fève, E. H. T. Teo, and B. Plaçais. A corner reflector of graphene Dirac fermions as a phonon-scattering sensor. *Nature Communications*, 10(1), jun 2019. DOI: 10.1038/s41467-019-10326-6.
- [35] K. Wang, M. M. Elahi, L. Wang, K. M. M. Habib, T. Taniguchi, K. Watanabe, J. Hone, A. W. Ghosh, G.-H. Lee, and P. Kim. Graphene transistor based on tunable Dirac fermion optics. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 116(14):6575–6579, mar 2019. DOI: 10.1073/pnas.1816119116. 1, 15, 21, 29
- [36] X. Zhou, A. Kerelsky, M. M. Elahi, D. Wang, K. M. M. Habib, R. N. Sajjad, P. Agnihotri, J. U. Lee, A. W. Ghosh, F. M. Ross, and A. N. Pasupathy. Atomic-Scale Characterization of Graphene p-n Junctions for Electron-Optical Applications. *ACS Nano*, jan 2019. DOI: 10.1021/acsnano.8b09575. 1, 21, 29
- [37] 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, 2, 15, 21
- [38] W. Mu, G. Zhang, Y. Tang, W. Wang, and Z. Ou-Yang. Electric current focusing efficiency in a graphene electric lens. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 23(49):495302, nov 2011. DOI: 10.1088/0953-8984/23/49/495302. 1, 15, 45
- [39] Y. Betancur-Ocampo. Partial positive refraction in asymmetric Veselago lenses of uniaxially strained graphene. *Physical Review B*, 98(20), nov 2018. DOI: 10.1103/physrevb.98.205421. 46
- [40] S. Prabhakar, R. Nepal, R. Melnik, and A. A. Kovalev. Valley-dependent Lorentz force and Aharonov-Bohm phase in strained graphene p-n junction. *Physical Review B*, 99(9), mar 2019. DOI: 10.1103/physrevb.99.094111. 1, 15, 46
- [41] Y. Jiang, J. Mao, D. Moldovan, M. R. Masir, G. Li, K. Watanabe, T. Taniguchi, F. M. Peeters, and E. Y. Andrei. Tuning a circular p-n junction in graphene from quantum confinement to optical guiding. *Nature Nanotechnology*, 12(11):1045–1049, sep 2017. DOI: 10.1038/nnano.2017.181. 1, 15, 16, 23, 36
- [42] 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. *Physical Review B*, 100(4), jul 2019. DOI: 10.1103/physrevb.100.041401. 15, 23, 36
- [43] B. Brun, N. Moreau, S. Somanchi, V.-H. Nguyen, A. Mreńca-Kolasińska, K. Watanabe, T. Taniguchi, J.-C. Charlier, C. Stampfer, and B. Hackens. Optimizing Dirac fermions quasi-confinement by potential smoothness engineering. *2D Materials*, 7(2):025037, mar 2020. DOI: 10.1088/2053-1583/ab734e. 1, 15, 22, 23, 36
- [44] S. Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, Sept. 1995. ISBN 9780511805776. DOI: 10.1017/cbo9780511805776. 3, 9
- [45] S. Datta. *Quantum Transport: Atom to Transistor*. Cambridge University Press, 2005. ISBN 9781139164313. DOI: 10.1017/cbo9781139164313. 3, 6, 8
- [46] T. Stegmann. *Quantum transport in nanostructures : From the effects of decoherence on localization to magnetotransport in two-dimensional electron systems*. Tesis doctoral, Universität Duisburg-Essen, 2014. URL https://duepublico2.uni-due.de/receive/duepublico_mods_00035708. 3, 13
- [47] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid state physics*. Harcourt College Publishers, New York, 1976. ISBN 0030839939. URL https://books.google.com.mx/books/about/Solid_State_Physics.html?id=1C9HAQAAIAAJ&redir_esc=y. 3
- [48] G. Grosso and G. Pastori-Parravicini. *Solid State Physics*. ELSEVIER SCIENCE & TECHNOLOGY, second edition, 2013. ISBN 0123850304. URL https://www.ebook.de/de/product/20340579/giuseppe_grosso_giuseppe_pastori_parravicini_solid_state_physics.html. 3, 4
- [49] 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. 13
- [50] 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(5):053016, may 2016. DOI: 10.1088/1367-2630/18/5/053016. 13, 15, 20, 43, 52, 53, 54
- [51] 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. 13
- [52] E. Paredes-Rocha, Y. Betancur-Ocampo, N. Szpak, and T. Stegmann. Gradient-index electron optics in graphene p-n junctions. *Physical Review B*, 103(4), jan 2021. DOI: 10.1103/physrevb.103.045404. 14, 81
- [53] A. K. Geim and K. S. Novoselov. The rise of graphene. *Nature Materials*, 6(3):183–191, mar 2007. DOI: 10.1038/nmat1849. 14
-

-
- [54] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim. Two-dimensional atomic crystals. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 102(30):10451–10453, jul 2005. DOI: 10.1073/pnas.0502848102. 14
- [55] S. Das, J. A. Robinson, M. Dubey, H. Terrones, and M. Terrones. Beyond Graphene: Progress in Novel Two-Dimensional Materials and van der Waals Solids. *Annual Review of Materials Research*, 45(1):1–27, jul 2015. DOI: 10.1146/annurev-matsci-070214-021034. 14
- [56] S. Barraza-Lopez, B. M. Fregoso, J. W. Villanova, S. S. Parkin, and K. Chang. Colloquium : Physical properties of group-IV monochalcogenide monolayers. *Reviews of Modern Physics*, 93(1), mar 2021. DOI: 10.1103/revmodphys.93.011001. 14
- [57] J. E. Barrios-Vargas. *Transporte electrónico en grafeno con desorden*. Tesis doctoral, Universidad Nacional Autónoma de México, 2012. URL https://ru.dgb.unam.mx/handle/DGB_UNAM/TES01000685740. 14, 16, 21, 47
- [58] F. Schwierz. Graphene transistors. *Nature Nanotechnology*, 5(7):487–496, may 2010. DOI: 10.1038/nnano.2010.89. 14
- [59] N. Savage. Materials science: Super carbon. *Nature*, 483(7389):S30–S31, mar 2012. DOI: 10.1038/483s30a. 15
- [60] B. Özyilmaz, P. Jarillo-Herrero, D. Efetov, and P. Kim. Electronic transport in locally gated graphene nanoconstrictions. *Applied Physics Letters*, 91(19):192107, nov 2007. DOI: 10.1063/1.2803074. 15
- [61] F. Xia, T. Mueller, R. Golizadeh-Mojarad, M. Freitag, Y. ming Lin, J. Tsang, V. Perebeinos, and P. Avouris. Photocurrent Imaging and Efficient Photon Detection in a Graphene Transistor. *Nano Letters*, 9(3):1039–1044, feb 2009. DOI: 10.1021/nl8033812.
- [62] T. Mueller, F. Xia, and P. Avouris. Graphene photodetectors for high-speed optical communications. *Nature Photonics*, 4(5):297–301, mar 2010. DOI: 10.1038/nphoton.2010.40.
- [63] M. C. Lemme, F. H. L. Koppens, A. L. Falk, M. S. Rudner, H. Park, L. S. Levitov, and C. M. Marcus. Gate-Activated Photoresponse in a Graphene p-n junction. *Nano Letters*, 11(10):4134–4137, oct 2011. DOI: 10.1021/nl2019068.
- [64] N. M. Gabor, J. C. W. Song, Q. Ma, N. L. Nair, T. Taychatanapat, K. Watanabe, T. Taniguchi, L. S. Levitov, and P. Jarillo-Herrero. Hot Carrier-Assisted Intrinsic Photoresponse in Graphene. *Science*, 334(6056):648–652, oct 2011. DOI: 10.1126/science.1211384.
-

-
- [65] L. Lin, L. Liao, J. Yin, H. Peng, and Z. Liu. Building graphene p–n junctions for next-generation photodetection. *Nano Today*, 10(6):701–716, dec 2015. DOI: 10.1016/j.nantod.2015.11.006. 15
- [66] T. Lohmann, K. von Klitzing, and J. H. Smet. Four-Terminal Magneto-Transport in Graphene p-n Junctions Created by Spatially Selective Doping. *Nano Letters*, 9(5):1973–1979, apr 2009. DOI: 10.1021/nl900203n.
- [67] K. Yan, D. Wu, H. Peng, L. Jin, Q. Fu, X. Bao, and Z. Liu. Modulation-doped growth of mosaic graphene with single-crystalline p–n junctions for efficient photocurrent generation. *Nature Communications*, 3(1), jan 2012. DOI: 10.1038/ncomms2286. 15
- [68] N. Liu, H. Tian, G. Schwartz, J. B.-H. Tok, T.-L. Ren, and Z. Bao. Large-Area, Transparent, and Flexible Infrared Photodetector Fabricated Using P-N Junctions Formed by N-Doping Chemical Vapor Deposition Grown Graphene. *Nano Letters*, 14(7):3702–3708, jun 2014. DOI: 10.1021/nl500443j. 15
- [69] M. Freitag, T. Low, and P. Avouris. Increased Responsivity of Suspended Graphene Photodetectors. *Nano Letters*, 13(4):1644–1648, mar 2013. DOI: 10.1021/nl4001037. 15
- [70] 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. 15, 16, 23, 43, 52, 53
- [71] T. Low and F. Guinea. Strain-Induced Pseudomagnetic Field for Novel Graphene Electronics. *Nano Letters*, 10(9):3551–3554, aug 2010. DOI: 10.1021/nl1018063.
- [72] N. Levy, S. A. Burke, K. L. Meaker, M. Panlasigui, A. Zettl, F. Guinea, A. H. C. Neto, and M. F. Crommie. Strain-Induced Pseudo-Magnetic Fields Greater Than 300 Tesla in Graphene Nanobubbles. *Science*, 329(5991):544–547, jul 2010. DOI: 10.1126/science.1191700. 52, 55
- [73] B. Amorim, A. Cortijo, F. de Juan, A. G. Grushin, F. Guinea, A. Gutiérrez-Rubio, H. Ochoa, V. Parente, R. Roldán, P. San-Jose, J. Schiefele, M. Sturla, and M. A. H. Vozmediano. Novel effects of strains in graphene and other two dimensional materials. *Physics Reports*, 617:1–54, mar 2016. DOI: 10.1016/j.physrep.2015.12.006. 52
- [74] G. G. Naumis, S. Barraza-Lopez, M. Oliva-Leyva, and H. Terrones. Electronic and optical properties of strained graphene and other strained 2D materials: a review. *Reports on Progress in Physics*, 80(9):096501, aug 2017. DOI: 10.1088/1361-6633/aa74ef. 52, 54
- [75] T. Stegmann and N. Szpak. Current splitting and valley polarization in elastically deformed graphene. *2D Materials*, 6(1):015024, dec 2018. DOI: 10.1088/2053-1583/aaea8d. 15, 43, 52, 53, 54, 55
-

-
- [76] M. Settnes, J. H. Garcia, and S. Roche. Valley-polarized quantum transport generated by gauge fields in graphene. *2D Materials*, 4(3):031006, jul 2017. DOI: 10.1088/2053-1583/aa7cbd. 15, 52, 54
- [77] Z.-Z. Cao, Y.-F. Cheng, and G.-Q. Li. Strain-controlled electron switch in graphene. *Applied Physics Letters*, 101(25):253507, dec 2012. DOI: 10.1063/1.4772505. 15, 46
- [78] T. Lien-Le and V. Lien-Nguyen. Quantitative study of electronic whispering gallery modes in electrostatic-potential induced circular graphene junctions. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 32(25):255502, mar 2020. DOI: 10.1088/1361-648x/ab7c16. 16, 36
- [79] B. Brun, V.-H. Nguyen, N. Moreau, S. Somanchi, K. W. T. Taniguchi, J.-C. Charlier, C. Stampferand, and B. Hackens. Transport through electronic whispering gallery modes in a graphene p-n junction. In *Graphene Conference 2020*, 2020. URL http://phantomsfoundation.com/GRAPHENECONF/2020/Abstracts/Grapheneconf2020_Brun_Boris_108.pdf. 16, 36, 37
- [80] 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 1108476996. URL https://www.ebook.de/de/product/38548382/luis_e_f_foa_torres_jean_christophe_charlier_introduction_to_graphene_based_nanomaterials_from_electronic_structure_to_quantum_transport.html. 16, 17
- [81] Y. Betancur-Ocampo, M. E. 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. 20
- [82] C.-L. Li. New position of Dirac points in the strained graphene reciprocal lattice. *AIP Advances*, 4(8):087119, aug 2014. DOI: 10.1063/1.4893239. 20
- [83] 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. 20
- [84] J. R. Schaibley, H. Yu, G. Clark, P. Rivera, J. S. Ross, K. L. Seyler, W. Yao, and X. Xu. Valleytronics in 2D materials. *Nature Reviews Materials*, 1(11), aug 2016. DOI: 10.1038/natrevmats.2016.55. 20
- [85] M. S. Dresselhaus and G. Dresselhaus. Intercalation compounds of graphite. *Advances in Physics*, 51(1):1–186, jan 2002. DOI: 10.1080/00018730110113644. 21

-
- [86] T. Ando, T. Nakanishi, and R. Saito. Berry's Phase and Absence of Back Scattering in Carbon Nanotubes. *Journal of the Physical Society of Japan*, 67(8):2857–2862, aug 1998. DOI: 10.1143/jpsj.67.2857. 21
- [87] G. G. Naumis. Internal mobility edge in doped graphene: Frustration in a re-normalized lattice. *Physical Review B*, 76(15), oct 2007. DOI: 10.1103/physrevb.76.153403. 21, 47
- [88] W. Brünger and W. Menz. Wirkungsquerschnitte für elastische und unelastische Elektronenstreuung an amorphen Kohlenstoff- und Germaniumschichten. *Zeitschrift für Physik*, 184(3):271–285, jun 1965. DOI: 10.1007/bf01383823. 23
- [89] H. A. Atwater and C. C. Ahn. Reflection electron energy loss spectroscopy during initial stages of Ge growth on Si by molecular beam epitaxy. *Applied Physics Letters*, 58(3):269–271, jan 1991. DOI: 10.1063/1.104685. 23
- [90] K. I. Bolotin, K. J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim, and H. L. Stormer. Ultrahigh electron mobility in suspended graphene. *Solid State Communications*, 146(9-10):351–355, jun 2008. DOI: 10.1016/j.ssc.2008.02.024. 23
- [91] J. E. Paredes-Rocha. Óptica electrónica en heterouniones de grafeno. Tesis de licenciatura, Universidad Nacional Autónoma de México, 2019. URL https://ru.dgb.unam.mx/handle/DGB_UNAM/TESO1000789339. 24, 27, 29
- [92] M. Born and E. Wolf. *Principles of Optics*. Cambridge University Press, oct 1999. DOI: 10.1017/cbo9781139644181. 25, 39
- [93] R. P. Mann, A. P. Nayak, M. S. Islam, V. J. Logeeswaran, E. Bormashenko, K. A. Wilson, and F. Vollmer. Whispering Gallery Mode Resonator Biosensors. In *Encyclopedia of Nanotechnology*, pages 2837–2849. Springer Netherlands, 2012. DOI: 10.1007/978-90-481-9751-4_121. 37
- [94] A. Gizatulin and A. Sultanov. Application of whispering gallery modes (WGM) in optical communications. In V. A. Andreev, V. A. Burdin, O. G. Morozov, A. H. Sultanov, and A. V. Bourdine, editors, *Optical Technologies in Telecommunications 2017*. SPIE, jun 2018. DOI: 10.1117/12.2317739. 37, 38
- [95] M. R. Foreman, J. D. Swaim, and F. Vollmer. Whispering gallery mode sensors. *Advances in Optics and Photonics*, 7(2):168, may 2015. DOI: 10.1364/aop.7.000168. 38
- [96] R. K. Luneberg. *Mathematical Theory of Optics*, pages 189–213. Brown University, Providence, R.I., 1944. URL <https://www.worldcat.org/title/mathematical-theory-of-optics/oclc/555173>. 40
-

-
- [97] J. I. Bohnert and H. P. Coleman. Applications of the Luneburg Lens. *NAVAL RESEARCH LABORATORY*, Mar. 1957. URL <https://apps.dtic.mil/dtic/tr/fulltext/u2/125707.pdf>. Unclassified 125707. 40
- [98] A. Demetriadou and Y. Hao. Slim Luneburg lens for antenna applications. *Optics Express*, 19(21):19925, sep 2011. DOI: 10.1364/oe.19.019925.
- [99] H. F. Ma and T. J. Cui. Three-dimensional broadband and broad-angle transformation-optics lens. *Nature Communications*, 1(1), nov 2010. DOI: 10.1038/ncomms1126. 40
- [100] Y. N. Demkov and V. N. Ostrovskii. Internal Symmetry of the Maxwell "Fish-eye" Problem and the Fock Group for the Hydrogen Atom. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 33(6):1083, Dec. 1971. URL <http://www.jetp.ac.ru/cgi-bin/e/index/e/33/6/p1083?a=list>. 40
- [101] A. V. Osipov, D. R. Prado, and O. Quevedo-Teruel. Flattened Generalized Maxwell Fish-eye Lens Limiting Sub-unity Refractive Index Regions. In *9th European Conference on Antennas and Propagation (EuCAP)*, Lisbon, Portugal, Apr. 2015. URL https://www.researchgate.net/publication/281836998_Flattened_Generalized_Maxwell_Fish-Eye_Lens. 40
- [102] H. Eskandari, M. S. Majedi, A. R. Attari, and O. Quevedo-Teruel. Elliptical generalized Maxwell fish-eye lens using conformal mapping. *New Journal of Physics*, 21(6):063010, jun 2019. DOI: 10.1088/1367-2630/ab2471. 40
- [103] Q. Lei, R. Foster, P. S. Grant, and C. Grovenor. Generalized Maxwell Fish-Eye Lens as a Beam Splitter: A Case Study in Realizing All-Dielectric Devices From Transformation Electromagnetics. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 65(12):4823–4835, dec 2017. DOI: 10.1109/tmtt.2017.2727495. 40
- [104] M. A. B. Abbasi and V. F. Fusco. Maxwell Fisheye Lens Based Retrodirective Array. *Scientific Reports*, 9(1), nov 2019. DOI: 10.1038/s41598-019-52779-1. 40
- [105] S. H. Badri and M. M. Gilarlue. Maxwell's fisheye lens as efficient power coupler between dissimilar photonic crystal waveguides. *Optik*, 185:566–570, may 2019. DOI: 10.1016/j.ijleo.2019.03.163. 40
- [106] V. M. Pereira, A. H. C. Neto, and N. M. R. Peres. Tight-binding approach to uniaxial strain in graphene. *Physical Review B*, 80(4), jul 2009. DOI: 10.1103/physrevb.80.045401. 43, 52, 53, 54
- [107] F. Libisch, T. Hirsch, R. Glattauer, L. A. Chizhova, and J. Burgdörfer. Veselago lens and Klein collimator in disordered graphene. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 29(11):114002, feb 2017. DOI: 10.1088/1361-648x/aa565e. 45, 46
-

-
- [108] J. Tworzydło, I. Snyman, A. R. Akhmerov, and C. W. J. Beenakker. Valley-isospin dependence of the quantum Hall effect in a graphene-p-n junction. *Physical Review B*, 76(3), jul 2007. DOI: 10.1103/physrevb.76.035411. 46
- [109] W. Long, Q. feng Sun, and J. Wang. Disorder-Induced Enhancement of Transport through Graphene p-n Junctions. *Physical Review Letters*, 101(16), oct 2008. DOI: 10.1103/physrevlett.101.166806.
- [110] J. Li and S.-Q. Shen. Disorder effects in the quantum Hall effect of graphene p-n junctions. *Physical Review B*, 78(20), nov 2008. DOI: 10.1103/physrevb.78.205308.
- [111] M. Deng, Y.-J. Wang, Y. Gang, and J.-F. Chen. Effect of uniaxial strain on the electronic transport through disordered graphene p-n junctions. *Modern Physics Letters B*, 30(26):1650337, sep 2016. DOI: 10.1142/s0217984916503371. 46
- [112] M. M. Fogler, D. S. Novikov, L. I. Glazman, and B. I. Shklovskii. Effect of disorder on a graphene-p-n junction. *Physical Review B*, 77(7), feb 2008. DOI: 10.1103/physrevb.77.075420. 46
- [113] E. Rossi, J. H. Bardarson, P. W. Brouwer, and S. D. Sarma. Signatures of Klein tunneling in disordered graphene-p-n junctions. *Physical Review B*, 81(12), mar 2010. DOI: 10.1103/physrevb.81.121408. 46, 47
- [114] N. Myoung, H. Choi, and H. C. Park. Manipulation of valley isospins in strained graphene for valleytronics. *Carbon*, 157:578–582, feb 2020. DOI: 10.1016/j.carbon.2019.10.040. 46
- [115] G. Yang, L. Li, W. B. Lee, and M. C. Ng. Structure of graphene and its disorders: a review. *Science and Technology of Advanced Materials*, 19(1):613–648, aug 2018. DOI: 10.1080/14686996.2018.1494493. 46
- [116] Y.-W. Tan, Y. Zhang, K. Bolotin, Y. Zhao, S. Adam, E. H. Hwang, S. D. Sarma, H. L. Stormer, and P. Kim. Measurement of Scattering Rate and Minimum Conductivity in Graphene. *Physical Review Letters*, 99(24), dec 2007. DOI: 10.1103/physrevlett.99.246803. 46
- [117] J.-H. Chen, C. Jang, S. Adam, M. S. Fuhrer, E. D. Williams, and M. Ishigami. Charged-impurity scattering in graphene. *Nature Physics*, 4(5):377–381, apr 2008. DOI: 10.1038/nphys935. 46
- [118] R. Ishikawa, S. D. Findlay, T. Seki, G. Sánchez-Santolino, Y. Kohno, Y. Ikuhara, and N. Shibata. Direct electric field imaging of graphene defects. *Nature Communications*, 9(1), sep 2018. DOI: 10.1038/s41467-018-06387-8. 46
- [119] E. H. Hwang, S. Adam, and S. D. Sarma. Carrier Transport in Two-Dimensional Graphene Layers. *Physical Review Letters*, 98(18), may 2007. DOI: 10.1103/physrevlett.98.186806. 46
-

-
- [120] J. Martin, N. Akerman, G. Ulbricht, T. Lohmann, J. H. Smet, K. von Klitzing, and A. Yacoby. Observation of electron–hole puddles in graphene using a scanning single-electron transistor. *Nature Physics*, 4(2):144–148, nov 2007. DOI: 10.1038/nphys781. 47
- [121] Y. Zhang, V. W. Brar, C. Girit, A. Zettl, and M. F. Crommie. Origin of spatial charge inhomogeneity in graphene. *Nature Physics*, 5(10):722–726, aug 2009. DOI: 10.1038/nphys1365. 46, 47
- [122] M. A. H. Vozmediano, M. I. Katsnelson, and F. Guinea. Gauge fields in graphene. *Physics Reports*, 496(4-5):109–148, nov 2010. DOI: 10.1016/j.physrep.2010.07.003. 52, 54
- [123] A. Georgi, P. Nemes-Incze, R. Carrillo-Bastos, D. Faria, S. V. Kusminskiy, D. Zhai, M. Schneider, D. Subramaniam, T. Mashoff, N. M. Freitag, M. Liebmann, M. Pratzer, L. Wirtz, C. R. Woods, R. V. Gorbachev, Y. Cao, K. S. Novoselov, N. Sandler, and M. Morgenstern. Tuning the Pseudospin Polarization of Graphene by a Pseudomagnetic Field. *Nano Letters*, 17(4):2240–2245, mar 2017. DOI: 10.1021/acs.nanolett.6b04870. 52
- [124] L. Meng, W.-Y. He, H. Zheng, M. Liu, H. Yan, W. Yan, Z.-D. Chu, K. Bai, R.-F. Dou, Y. Zhang, Z. Liu, J.-C. Nie, and L. He. Strain-induced one-dimensional Landau level quantization in corrugated graphene. *Physical Review B*, 87(20), may 2013. DOI: 10.1103/physrevb.87.205405. 52
- [125] R. Carrillo-Bastos, C. León, D. Faria, A. Latgé, E. Y. Andrei, and N. Sandler. Strained fold-assisted transport in graphene systems. *Physical Review B*, 94(12), sep 2016. DOI: 10.1103/physrevb.94.125422. 52
- [126] A. Carpio, L. L. Bonilla, F. de Juan, and M. A. H. Vozmediano. Dislocations in graphene. *New Journal of Physics*, 10(5):053021, may 2008. DOI: 10.1088/1367-2630/10/5/053021. 52
- [127] J. H. Warner, E. R. Margine, M. Mukai, A. W. Robertson, F. Giustino, and A. I. Kirkland. Dislocation-Driven Deformations in Graphene. *Science*, 337(6091): 209–212, jul 2012. DOI: 10.1126/science.1217529. 52
- [128] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone. Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene. *Science*, 321(5887):385–388, jul 2008. DOI: 10.1126/science.1157996. 52, 55
- [129] C.-L. Wong, M. Annamalai, Z.-Q. Wang, and M. Palaniapan. Characterization of nanomechanical graphene drum structures. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 20(11):115029, oct 2010. DOI: 10.1088/0960-1317/20/11/115029.
- [130] Y. Shin, M. Lozada-Hidalgo, J. L. Sambricio, I. V. Grigorieva, A. K. Geim, and C. Casiraghi. Raman spectroscopy of highly pressurized graphene membranes. *Applied Physics Letters*, 108(22):221907, may 2016. DOI: 10.1063/1.4952972. 55
-

-
- [131] R. Carrillo-Bastos, D. Faria, A. Latgé, F. Mireles, and N. Sandler. Gaussian deformations in graphene ribbons: Flowers and confinement. *Physical Review B*, 90(4), jul 2014. DOI: 10.1103/physrevb.90.041411. 53
- [132] R. Carrillo-Bastos, M. Ochoa, S. A. Zavala, and F. Mireles. Enhanced asymmetric valley scattering by scalar fields in nonuniform out-of-plane deformations in graphene. *Physical Review B*, 98(16), oct 2018. DOI: 10.1103/physrevb.98.165436.
- [133] M. Settnes, S. R. Power, J. Lin, D. H. Petersen, and A.-P. Jauho. Bubbles in graphene - a computational study. *Journal of Physics: Conference Series*, 647: 012022, oct 2015. DOI: 10.1088/1742-6596/647/1/012022. 55
- [134] S. P. Milovanović, M. Ž. Tadić, and F. M. Peeters. Graphene membrane as a pressure gauge. *Applied Physics Letters*, 111(4):043101, jul 2017. DOI: 10.1063/1.4995983. 52, 55
- [135] R. M. Ribeiro, V. M. Pereira, N. M. R. Peres, P. R. Briddon, and A. H. C. Neto. Strained graphene: tight-binding and density functional calculations. *New Journal of Physics*, 11(11):115002, nov 2009. DOI: 10.1088/1367-2630/11/11/115002. 53
- [136] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis. Generalizing the Fermi velocity of strained graphene from uniform to nonuniform strain. *Physics Letters A*, 379(40-41): 2645–2651, oct 2015. DOI: 10.1016/j.physleta.2015.05.039. 53, 54
- [137] G. E. Volovik and M. A. Zubkov. Emergent geometry experienced by fermions in graphene in the presence of dislocations. *Annals of Physics*, 356:255–268, may 2015. DOI: 10.1016/j.aop.2015.03.005. 54
- [138] F. de Juan, M. Sturla, and M. A. H. Vozmediano. Space Dependent Fermi Velocity in Strained Graphene. *Physical Review Letters*, 108(22), may 2012. DOI: 10.1103/physrevlett.108.227205.
- [139] F. de Juan, J. L. Mañes, and M. A. H. Vozmediano. Gauge fields from strain in graphene. *Physical Review B*, 87(16), apr 2013. DOI: 10.1103/physrevb.87.165131. 53
- [140] E.-A. Kim and A. H. C. Neto. Graphene as an electronic membrane. *EPL (Europhysics Letters)*, 84(5):57007, dec 2008. DOI: 10.1209/0295-5075/84/57007. 54
- [141] P. Nemes-Incze, G. Kukucska, J. Koltai, J. Kürti, C. Hwang, L. Tapasztó, and L. P. Biró. Preparing local strain patterns in graphene by atomic force microscope based indentation. *Scientific Reports*, 7(1), jun 2017. DOI: 10.1038/s41598-017-03332-5. 55, 61
- [142] F. Guinea, M. I. Katsnelson, and A. K. Geim. Energy gaps and a zero-field quantum Hall effect in graphene by strain engineering. *Nature Physics*, 6(1): 30–33, sep 2009. DOI: 10.1038/nphys1420. 55
-

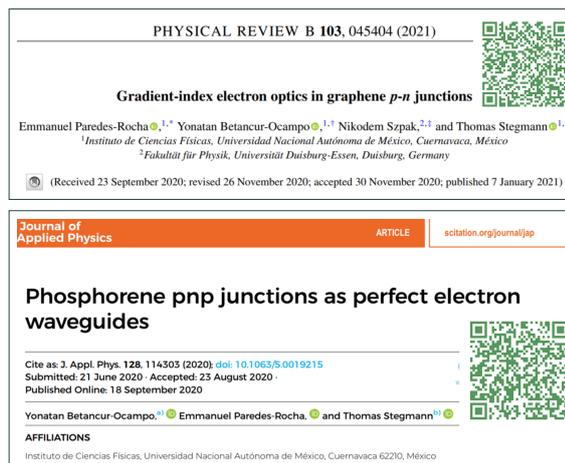
- [143] Y. Betancur-Ocampo, E. Paredes-Rocha, and T. Stegmann. Phosphorene pnp junctions as perfect electron waveguides. *Journal of Applied Physics*, 128(11): 114303, sep 2020. DOI: 10.1063/5.0019215. 81

Artículos

Enseguida, se enlistan los artículos publicados de los resultados desarrollados en la investigación del programa de maestría correspondiente a esta tesis.

1. [52] **Gradient-index electron optics in graphene pn junctions**
E. Paredes-Rocha, Y. Betancur Ocampo, N. Szpak and T. Stegmann
Phys. Rev. B 103, 045404 (2021)
2. [143] **Phosphorene pnp junctions as perfect electron waveguides**
Y. Betancur Ocampo, E. Paredes-Rocha and T. Stegmann
J. Appl. Phys. 128, 114303 (2020)

Se puede acceder a los artículos libremente en el perfil de ResearchGate de Emmanuel Paredes-Rocha, o presionando las siguientes imágenes:



A FAVOR DE LA CIENCIA ABIERTA, CIENCIA PARA TODXS.