



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

TRANSPORTE ELECTRÓNICO EN
NANOESTRUCTURAS BIDIMENSIONALES DE
FOSFORENO

T E S I S

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
FÍSICO

PRESENTA:

Raúl Jorge Domínguez Vilchis

DIRECTOR DE TESIS:

Dr. Thomas Werner Stegmann



Ciudad Universitaria, CDMX, 2022



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

1. Datos del alumno

Domínguez

Vilchis

Raúl Jorge

5526916109

Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ciencias

Física

310019040

2. Datos del tutor

Dr.

Thomas Werner

Stegmann

3. Datos del sinodal 1

Dr.

Francois

Leyvraz

Waltz

4. Datos del sinodal 2

Dra.

Manan

Vyas

5. Datos del sinodal 3

Dr.

José Eduardo

Barrios

Vargas

6. Datos del sinodal 4

Dr.

Maurice

Oliva

Leyva

7. Datos del trabajo escrito

Transporte electrónico en nanoestructuras bidimensionales de fosforeno

59 pág.

2022

Agradecimientos

En primer lugar, quiero agradecer al Dr. Thomas Werner Stegmann, por hacer posible la realización de dicha tesis, además de haber contado en todo momento con su apoyo y el haber supervisado mi licenciatura en Física, por haberme brindado la oportunidad de investigar junto a él, así como también me dio la gran oportunidad de haberme abierto muchas otras grandes posibilidades.

Deseo agradecer al Maestro Emmanuel Paredes Rocha por revisar y agregar comentarios muy constructivos que fueron de gran utilidad para la redacción y el buen entendimiento de esta tesis. Además de brindarme en todo momento el apoyo necesario, al Maestro Emmanuel así como el Dr. Stegmann.

Por otra parte agradezco a los proyectos UNAM PAPIIT IA103020, IN103922 y el proyecto Conacyt Ciencia Básica A1-S-13469, por el apoyo para realizar esta investigación, por la beca recibida y por la oportunidad de presentar mis resultados en el LXIV Congreso Nacional de Física.

Agradezco el apoyo de mis amigos, compañeros, familiares por ayudarme a mantener la calma para no caer en la locura, por su tiempo y por cada uno de los recuerdos que dejaron en mi memoria.

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.

Raúl Jorge Domínguez Vilchis. Ciudad Universitaria, CDMX, 2022

*„La locura, a veces, no es otra cosa que la razón presentada bajo diferente forma”
“Donde hay mucha luz, la sombra es profunda.”*

J. W. von Goethe

Resumen

En esta tesis, se estudia teóricamente el transporte electrónico de nanoestructuras bidimensionales de Fosforeno, mediante el método de funciones de Green fuera del equilibrio (NEGF). Se discute el transporte electrónico, la densidad local de estados y los efectos de borde. Se debate también de la cuantificación de la resistencia, conocido como el efecto Hall cuántico entero. Junto con este fenómeno se presenta también que la conductancia \mathcal{G} , toma valores cuantizados. Éste da lugar al fenómeno conocido como los niveles de Landau. Esto sucede debido a que los electrones son sometidos a un campo magnético perpendicular fuerte sobre la superficie bidimensional.

La idea principal se basa en los modelos de Hamiltoniano efectivo y de amarre fuerte que se discute con mayor detalle en el trabajo. Se calcula el flujo de corriente local así como la densidad local de los estados, desde distintas direcciones (*Armchair* y *Zigzag*) por medio de la Fuente y el Drenaje, para mostrar la fuerte anisotropía del material.

En el estudio del magnetotransporte, al utilizar campos magnéticos débiles, observamos que la resistencia de Hall muestra un comportamiento lineal, que aumenta proporcionalmente con el valor del campo magnético B , es decir, se comporta de manera muy similar al convencional gas de electrones bidimensional. Cuando el campo magnético aumenta, se observan oscilaciones de resistencia anómalas, las cuales se pueden explicar por medio de la superposición de mesetas de la resistencia en función del campo magnético; fenómenos conocidos como la resistencia de Hall cuántica entero y los niveles de Landau. Todas las oscilaciones de la resistencia de Hall cuántica pueden explicarse por la interferencia de los canales de borde que se encuentran ocupados.

La tesis concluye con propiedades importantes puntuales como el comportamiento de los electrones en el material, su trayectoria con y sin campo magnético, el fenómeno de la resistencia de Hall cuántico entero y los niveles de Landau, lo que lleva al sistema a la conducción de los electrones en los estados de borde.

Abstract

In this thesis, the electronic transport of two-dimensional phosphorene nanostructures is studied theoretically, by means of the non-equilibrium Green's function method (NEGF). Electronic transport, local density of states and edge effects are discussed. The quantization of resistance, known as the integer quantum Hall effect, is also discussed. Along with this phenomenon, it is also presented that the conductance \mathcal{G} , takes quantized values. This gives rise to the phenomenon known as Landau levels. This happens because the electrons are subjected to a strong perpendicular magnetic field on the two-dimensional surface.

The main idea is based on the continuum and tight binding Hamiltonian models that are discussed in more detail in the paper. The local current flow is calculated as well as the local density of states, from different directions (*Armchair* and *Zigzag*) via Source and Drain, to show the strong anisotropy of the material.

For the study of magnetotransport, when using weak magnetic fields, we observe that the Hall resistance shows a linear behavior, which increases proportionally with the value of the magnetic field B , that is, it behaves in a very similar way to the conventional two-dimensional electron gas. When the magnetic field increases, anomalous resistance oscillations are observed, which can be explained by the superposition of resistance plateaus as a function of the magnetic field; phenomena known as the integer quantum Hall resistance and Landau levels. All the oscillations of the quantum Hall resistance can be explained by the interference of the edge channels that are occupied.

The thesis concludes with important properties such as the behavior of the electrons in the material, their trajectory with and without a magnetic field, the phenomenon of the integer quantum Hall resistance and the Landau levels, which leads the system to conduct electrons in the edge states.

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	IX
Abstract	X
1. Introducción	1
2. Fundamentos del transporte electrónico y Teoría cuántica	5
2.1. Hamiltoniano del nanosistema	5
2.2. Método de funciones de Green fuera de equilibrio (NEGF)	6
2.2.1. Efecto de un campo magnético externo	6
2.2.2. La función espectral y densidad de estados	6
2.2.3. Función de Green	7
2.2.4. Función de correlación G^m	8
2.3. Función de Green en sistemas cuánticos abiertos	8
2.4. Corriente para sistemas cuánticos abiertos	13
2.4.1. Conductancia y resistencia	15
3. Fosforeno	17
3.1. Características del Fosforeno	17
3.1.1. Red del Fosforeno	19
3.1.2. Hamiltoniano del Fosforeno	21
3.1.3. Propiedades electrónicas de las nanocintas del Fosforeno	22
3.1.4. Anisotropía y masas efectivas en Fosforeno	23
3.2. Contactos en Nanocintas de Fosforeno	25
3.2.1. Extensión del método de NEGF a varios contactos	25
3.2.2. Contactos de Banda Ancha	28
3.2.3. Contactos en las simulaciones	28
3.3. Bases y principios del efecto Hall cuántico	29

4. Resultados Numéricos y Análisis	31
4.1. Magnetotransporte en nanocintas de Fosforeno	31
4.1.1. Niveles de Landau	32
4.1.2. Efecto Hall cuántico	33
4.1.3. Estados de borde	36
4.1.4. Ancho de los estados de borde	37
4.1.4.1. Estados de borde a lo largo de la dirección x (Armchair)	40
4.1.4.2. Estados de borde a lo largo de la dirección y (Zigzag).	41
4.2. Anisotropía, flujo local de corriente y LDOS	42
4.2.1. Sin efectos de borde	42
4.2.1.1. Contactos en bordes <i>Armchair</i>	43
4.2.1.2. Contactos en bordes <i>Zigzag</i>	44
4.2.1.3. Contactos en ambos bordes	45
4.2.2. Efectos de borde	46
5. Conclusiones	49
A. Dispersión del haz de electrones	51
B. Tamaño de las nanocintas	53
Bibliografía	54

Introducción

A partir del descubrimiento del Grafeno [1], que se caracteriza por ser bidimensional, se ha posicionado en el centro de estudio de los científicos en los últimos años, debido a sus increíbles propiedades y aplicaciones las cuales son muy prometedoras de este singular material [2]. Debido a las grandes oportunidades que el Grafeno nos puede brindar, los científicos de hoy en día se han dado a la tarea de realizar materiales bidimensionales a los cuales también se les atribuye grandes e increíbles propiedades, así como aplicaciones.

Aunque existen diversas estructuras bidimensionales inspiradas desde la fabricación del Grafeno en el 2004 [3], han surgido otros materiales bidimensionales como lo es el Germaneno [4], Siliceno, el Nitruro de Boro hexagonal (BN), Borofeno, dicalcogenuros de metales de transición y otros [5-8]. Estos últimos materiales han causado gran interés, ya que estas estructuras tienen grandes cualidades, únicas de cada material. Esto debido al confinamiento cuántico y a los efectos de borde que se presentan en estas estructuras; grandes cualidades ópticas, electrónicas así como también propiedades magnéticas de gran utilidad son las que se pueden encontrar.

El estudio del transporte electrónico sobre estas estructuras ha cambiado en las últimas dos décadas [9], debido a que a escalas muy pequeñas (dimensiones de nanómetros), estos materiales son bastante más interesantes que los convencionales ya que pueden dar un gran impulso en la industria microelectrónica [10, 11]. En resumen, materiales como el Germanio o el Silicio que son los materiales convencionales usados como semiconductores, de los cuales se han realizado millones de estudios y donde se ha podido comprender en casi un 100 % sus propiedades electrónicas como son la masa efectiva, la movilidad de portadores, la banda de valencia, la banda de conducción y la banda prohibida. En cambio, en estos nuevos materiales 2D es muy escaso el conocimiento que se tiene de ellos; incluso en el peor de los casos se desconocen hasta que punto son estables estas propiedades, pues de hecho en algunos materiales solo se tiene como base las predicciones que se llevan a cabo a partir de la teoría. Por ello, se necesita un estudio mucho más detallado para poder comprobar la utilidad de estos nuevos materiales.

Otra posible causa que ha cambiado el estudio del transporte electrónico en materiales 2D se debe a que en los primeros años, debido a la gran dificultad para sintetizar estos materiales, no se le había dado la importancia correspondiente como ahora. Ha cambiado el modo de sintetizar estos materiales sin tanta complicación, de esta manera no solo nos limitamos a estudiar de algunas de sus propiedades. Si no que ahora gracias a la teoría de la densidad funcional, al gran avance de las computadoras, métodos numéricos y algoritmos, es posible estudiar gran parte de las propiedades de los materiales 2D. Entre estas propiedades se encuentran las ópticas electrónicas, magnetotransporte, transporte electrónico, estructura atómica, incluso la fuerza de interacción entre partículas electrón-electrón, electrón-fonón [9].

Sin embargo, a pesar de este progreso, nuestro estudio sobre dichos materiales es todavía muy limitado, por lo que solo nos enfocaremos a hacer un riguroso análisis para el Fósforo Negro (Fosforeno). Se hace frente a las incertidumbres que existen en este material, debido a sus singulares propiedades y su intrínseca banda prohibida que lo convierte en un semiconductor ideal. Como se ha mencionado, hace falta mucho que entender de estos materiales.

En particular, el Fosforeno tiene la gran ventaja de tener una banda prohibida intrínseca, en comparación con otros materiales, en particular el grafeno. Un dilema fundamental se encuentra en las aplicaciones de nanocintas de dichos materiales pues éstos últimos requieren de un transporte electrónico más riguroso para evitar las perturbaciones que se generan dado los efectos de borde. Otra desventaja de estos materiales ante el Fosforeno, es que el transporte electrónico se encuentra localizado en los bordes [12, 13]; por ejemplo, las impurezas que se localizan en los bordes pueden suprimir fuertemente la movilidad de los portadores en los canales de transporte, por dispersión u otras causas [14, 15], mientras que para las nanocintas de Fosforeno se muestra una alta movilidad en los portadores de carga tanto teórico como experimental, aún en la presencia de dichas impurezas, esto debido a su estructura hexagonal corrugada, véase [16]. Otros materiales bidimensionales alternativos en propiedades electrónicas al Fosforeno presentan una morfología metálica en los bordes, por ejemplo el Grafeno por el borde zigzag [17, 18], lo que provoca que exista poca respuesta al voltaje que se inyecta en la fuente, lo que resulta muy poco provechoso para la industria microelectrónica; en cambio, para las nanocintas de Fosforeno, dada su estructura electrónica, tiene una alta respuesta al voltaje que se inyecta por la fuente, una característica superior ante otros materiales similares. Por estos motivos es que, recientemente el Fosforeno y sus similares han llamado bastante la atención de los científicos, por sus propiedades electrónicas y magnéticas que parecen ser únicas [19-24], lo que significa un gran avance en la Nanociencia e industria microelectrónica.

Son las razones anteriores por las que en esta tesis se estudia el transporte cuántico teóricamente a través de las nanocintas de Fósforo Negro (Fosforeno). Nuestro objetivo es ampliar la información conocida que se tiene hasta el día de hoy de este material sobre el entendimiento de las propiedades electrónicas, magnéticas, la movilidad de portadores, el comportamiento de la densidad local de corriente, la densidad local de los estados y la cuantificación de la resistividad, para contribuir una pequeña parte al desarrollo de una tecnología futura. En el capítulo 2, comenzamos con una breve introducción del método de las funciones de Green fuera del equilibrio (NEGF), el cual nos permite calcular el transporte de electrones en Fosforeno usando como base la teoría cuántica (modelos del Hamiltoniano efectivo y de amarre fuerte). En el capítulo 3, aplicaremos este método de NEGF para poder realizar el estudio del transporte cuántico a través de redes de Fosforeno. Se discutirá la conducción de los electrones, la cuantificación de la conductancia, así como también el transporte electrónico que tiene un régimen entre el clásico y el cuántico. Posteriormente, en el capítulo 4, se estudia el magnetotransporte y la fuerte anisotropía en el Fosforeno, donde los electrones son inyectados por medio de una fuente y recolectados por un drenaje: y los cuales son sometidos bajo un campo magnético perpendicular de diferentes magnitudes. Es de especial interés como cambian las propiedades del sistema; cuando el campo magnético aumenta considerablemente, se observan mesetas extendidas para la resistencia. En ausencia del campo magnético, se aprecian distintos comportamientos de los electrones. Por último en el capítulo 5, daremos a conocer las conclusiones junto con una breve perspectiva de los resultados obtenidos y las consecuencias que puedan repercutir en el futuro de la tecnología.

Fundamentos del transporte electrónico y Teoría cuántica

En el presente capítulo se hace una introducción al transporte cuántico en nanosistemas. Se utiliza el modelo de amarre fuerte (*tight-binding*) y una breve pero esencial introducción a las ecuaciones del método de funciones de Green fuera de equilibrio (NEGF); los detalles han sido descritos por T. Stegmann [25] y por los libros de Datta [26, 27]. En el presente trabajo, se seguirá esta teoría considerando un nanosistema que conduce a las nanocintas de Fosforeno, con el propósito de calcular el flujo de corriente local, la densidad local de estados y la resistividad.

2.1. Hamiltoniano del nanosistema

Usando el modelo de amarre fuerte, un nanosistema puede ser descrito por un Hamiltoniano H , que en esta tesis es de la forma

$$H = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{j < i} (t_{ij} |i\rangle \langle j| + \text{H.c.}). \quad (2.1)$$

El Hamiltoniano H (2.1) descrito por el modelo de amarre fuerte puede ser visualizado mediante una red de nodos y enlaces, donde ε_i indica el potencial orbital, necesario para ocupar el estado $|i\rangle$ (estado del *i-ésimo* sitio) por un electrón. El término t_{ij} es la energía de enlace entre el estado $|i\rangle$ y $|j\rangle$ (entre los estados del *j-ésimo* al *i-ésimo* sitio) [28].

La figura 2.1 es la visualización del Hamiltoniano (2.1), muestra una red de nodos (círculos negros) encerrados por una elipse punteada, donde la energía de enlace esta representada mediante líneas azules entre sitios y la energía de sitio de cada átomo es representada en rojo.

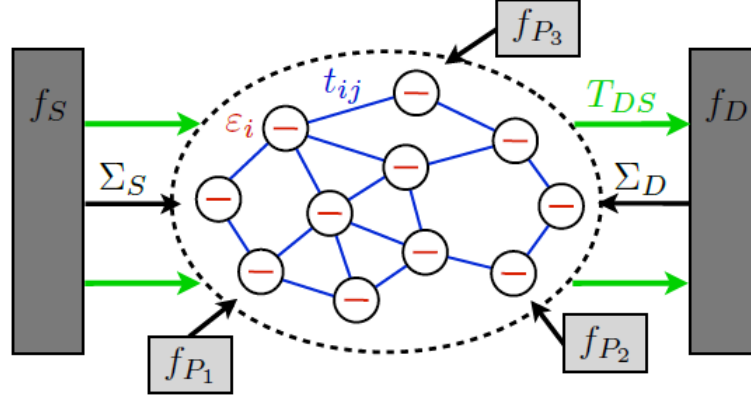


Fig. 2.1: Transporte de electrones a través de un nanosistema abierto, conectado desde la fuente S al drenaje D que se estudia en esta tesis. El Hamiltoniano H del sistema está descrito por (2.1). Se puede visualizar el nanosistema como una red de nodos y enlaces, donde la energía para cada nodo es ε_i y la energía de enlace es t_{ij} . Obsérvese la región encerrada por la elipse punteada. También se supone un contacto adicional P_i conectado al sistema. Todos los reservorios se caracterizan por la función de distribución de la energía f_p , con $p \in \{S, D, P_1, P_2, P_3\}$. Figura tomada de [25, fig. 2.1].

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

En esta sección vamos a hacer una introducción a las ecuaciones y conceptos de resultados muy importantes del método de NEGF: la función de Green y la función de correlación. Éstas permiten hacer el cálculo numérico del flujo local de corriente como también la densidad local de estados en el nanosistema.

2.2.1. Efecto de un campo magnético externo

El efecto de un campo magnético \mathbf{B} se puede considerar de la siguiente manera

$$t_{ij}(\mathbf{B}) = t_{ij}(\mathbf{B} = \mathbf{0})e^{i\frac{e}{\hbar} \int d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}}, \quad (2.2)$$

donde \mathbf{A} es el potencial vectorial del campo magnético. La integral de trayectoria es a lo largo de la recta que conecta entre la posición i y j (i -ésimo y j -ésimo sitio) en el espacio. Para un desarrollo detallado de esta sustitución se puede revisar las lecturas de Feynman [29, cáp. 21-1], cuyo objetivo es expresar el principio de acoplamiento invariante mínimo de norma. En la literatura esta sustitución también se le conoce como sustitución de Peierls [30, 31].

2.2.2. La función espectral y densidad de estados

La función espectral está definida a partir del Hamiltoniano H del modelo de amarre fuerte como

$$A(E) := 2\pi\delta(EI - H), \quad (2.3)$$

donde I es la matriz identidad y E es la energía del electrón; obsérvese que la matriz EI tiene la misma dimensión que la matriz H . A partir de este punto se asumirá que E está multiplicando a la matriz identidad cuando se trata de matrices.

En el espacio real, la expansión de términos de las eigenfunciones $\Psi_k(r)$ y las eigenenergías ϵ_k del Hamiltoniano H , la función espectral se puede escribir como

$$A(r, r', E) = 2\pi \sum_k \Psi_k(r) \delta(E - \epsilon_k) \Psi_k^*(r'). \quad (2.4)$$

Se muestra que los elementos de la diagonal de la función espectral (dejando a un lado el factor 2π) dan como resultado la densidad local de los estados $D(r, E)$ (LDOS)¹. La densidad total de estados $D(E)$ (DOS). Se puede obtener mediante la suma sobre todo el espacio de los LDOS, por lo tanto se puede obtener como la traza de (2.3)

$$D(E) = \frac{1}{2\pi} \text{Tr}(A(E)) = \sum_k \delta(E - \epsilon_k). \quad (2.5)$$

2.2.3. Función de Green

Las funciones de Green asociadas a un nanosistema; están relacionadas con la función espectral A . La función de distribución δ de (2.4) también se puede representar como

$$2\pi\delta(E - \epsilon_k) = \frac{2\nu}{(E - \epsilon_k)^2 + \nu^2} = i \left[\frac{1}{E - \epsilon_k + i\nu} - \frac{1}{E - \epsilon_k - i\nu} \right], \quad (2.6)$$

donde ν es un número infinitesimal positivo. Considerando ahora esta representación de la función de distribución δ , reescribimos la función espectral (2.3), obteniendo como resultado

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

donde se ha definido la función de Green retardada G y la función de Green avanzada G^\dagger (simplemente función de Green). De la definición de la función espectral (2.7), como el DOS

¹ Ya que el LDOS se da $\rho(\mathbf{r}, E) = \frac{1}{2\pi} A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$ y el elemento matriz que corresponde a i -ésimo está dado por $\rho_i(\mathbf{r}) = |\psi_i(\mathbf{r})|^2$

tiene que ser positivo, los elementos de la matriz diagonal de la función de Green deben cumplir $\text{Im}(G_{ii}) < 0$.

2.2.4. Función de correlación G^n

Considerando el marco de una sola partícula, la correlación entre dos estados $|i\rangle$ y $|j\rangle$ del nanosistema; está descrito para un elemento como

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

La definición anterior de G^n muestra que la diagonal de la matriz ($i = j$) contiene la auto-correlación del estado $|i\rangle$, en la base local $\langle \mathbf{r} | \dots | \mathbf{r} \rangle$ da $G_{ii}^n = 2\pi |\Psi_i(r)|^2$, es decir, la densidad de probabilidad (o densidad de electrones) asociada a este estado (salvo un factor de 2π).

En equilibrio, la densidad de electrones está determinada por la ocupación de la densidad de estados según la distribución de Fermi $f(E - \mu)$, con μ como el potencial químico, es decir, que todos los estado están ocupados hasta el valor del potencial químico μ (despreciando efectos de temperatura finita). Por lo tanto, concluimos que en equilibrio la función de correlación está relacionada con la función espectral por

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

2.3. Función de Green en sistemas cuánticos abiertos

El estudio del transporte cuántico a través de un nanosistema, requiere de conectar una fuente S por donde se van a inyectar los electrones y de un drenaje D que los recolecte. Representados como rectángulos de color gris oscuro en la figura 2.1, estos contactos están conectados a un nanosistema, cuyo Hamiltoniano H esta descrito por el modelo de amarre fuerte. Dado el equilibrio local de los reservorios (de la fuente como del drenaje), su distribución de energía se caracteriza por la distribución de Fermi $f_{S/D} \equiv f(E - \mu_{S/D})$, donde $\mu_{S/D}$ como el potencial químico correspondiente a cada reservorio respectivamente. Al aplicar un voltaje V al nanosistema cumple que $\mu_S - \mu_D = eV$, siendo e la carga del electrón, de tal manera que la diferencia entre f_S y f_D coloca al sistema en una situación fuera de equilibrio y provoca el flujo de corriente a través del nanosistema. Por otra parte, el efecto de tener reservorios adicionales con el fin de medir el potencial local, son representados por rectángulos de color gris en la figura 2.1, se analiza con profundidad en la sección 3.2.

La conexión de los reservorios al nanosistema se describe mediante la matriz de acoplamiento $\tau_{S/D}$. Por lo tanto, la matriz τ define los sitios (o átomos) del nanosistema que se van a acoplar con el contacto. Al conectar los reservorios al nanosistema, dichos reservorios sufren de algunas perturbaciones, ya que por un lado se inyecta o se extraen electrones (depende del reservorio al que se hace referencia) y a su vez el nanosistema re-inyecta o re-extrae (nuevamente depende del reservorio) electrones del reservorio.

Considerando el caso cuando los reservorios se encuentran aislados, pueden ser descritos por el Hamiltoniano $H_{S/D}$, que cumple con la ecuación de Schrödinger

$$(E - H_S) |\Phi_S\rangle = 0, \quad (2.10a)$$

$$(E - H_D) |\Phi_D\rangle = 0. \quad (2.10b)$$

Los contactos² se perturban en el momento de conectarse con el nanosistema, por lo que las ecuaciones de Schrödinger anteriores pueden reescribirse de la forma

$$(E - H_S + i\nu) |\Phi_S\rangle = |Q_S\rangle, \quad (2.11a)$$

$$(E - H_D + i\nu) |\Phi_D\rangle = |Q_D\rangle, \quad (2.11b)$$

donde ν es un número infinitesimal positivo. El término $i\nu |\psi_{S/D}\rangle$ representa la inyección o extracción de electrones de los contactos a través del nanosistema, mientras que el término $|Q_{S/D}\rangle$ representa la re-inyección o re-extracción (depende del contacto) de los electrones, es decir, que significa una ganancia en el nanosistema.

Considerando el Hamiltoniano efectivo como $H_{ef} = H_{S/D} - i\nu$, entonces los estados en el reservorio son $|\psi_{S/D}(t)\rangle = e^{itH_{ef}/\hbar} |\psi_{S/D}\rangle = \left[e^{itH_{S/D}/\hbar} |\psi_{S/D}\rangle \right] [e^{-\nu t/\hbar}]$. Si bien el segundo término de esta expresión es un decaimiento exponencial. Que representa una pérdida para el sistema; para compensar dicha pérdida motiva a introducir el término $|Q_{S/D}\rangle$. De tal manera que para mantener el equilibrio en los reservorios del sistema, la cantidad de electrones re-inyectada debe ser la misma que la re-extraída, por lo tanto se debe cumplir que $i\nu |\Phi_{S/D}\rangle = |Q_{S/D}\rangle$.

En esta última ecuación (2.11), el término E ya no es una eigenenergía del Hamiltoniano, sino una variable independiente que da la energía de las excitaciones $|Q_{S/D}\rangle$ de fuentes externas. Mientras que en la ecuación (2.10) el término $|\Phi_{S/D}\rangle$ es distinto de cero sólo para las energías propias, en (2.11) el término $|\Phi_{S/D}\rangle$ pueden ser distintos de cero para cualquier energía y representan la respuesta de los reservorios a las excitaciones externas.

Ahora bien, cuando los reservorios se conectan al nanosistema mediante la matriz de acoplamiento $\tau_{S/D}$, los estados $|\Phi_{S/D}\rangle$ en los reservorios se desbordan y excitan a los estados $|\psi\rangle$ en el nanosistema, a su vez estos estados excitados del nanosistema pueden volver al reservorio

² A los reservorios que se conectan al nanosistema también se les llama *contactos*.

ahora como estados excitados $|\varphi_{S/D}\rangle$. Por lo que la ecuación de Schörodinger para el nanosistema acoplado, es decir, los reservorios conectados al nanosistema, da como resultado

$$\begin{pmatrix} E - H_S + i\nu & -\tau_S^\dagger & 0 \\ -\tau_S & E - H & -\tau_D \\ 0 & -\tau_D^\dagger & E - H_D + i\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_S + \varphi_S \\ \psi \\ \Phi_D + \varphi_D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_S \\ 0 \\ Q_D \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Se puede asumir que la re-inyección o re-extracción de electrones debido al término $|Q_{S/D}\rangle$ no se ve afectada por la matriz de acoplamiento τ , por lo que se puede obtener una expresión para los estados excitados que se inyectan en los reservorios. Considerando las filas correspondientes a los contactos de la ecuación (2.12). Tomando como referencia la ecuación (2.11), como resultado se tienen las expresiones

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

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

en donde

$$G_S \equiv (E - H_S + i\nu)^{-1}, \quad (2.14a)$$

$$G_D \equiv (E - H_D + i\nu)^{-1} \quad (2.14b)$$

son las funciones de Green de los reservorios, respectivamente. Considerando la expresión (2.13), la fila de en medio que corresponde al nanosistema de la ecuación (2.12), se puede expresar como

$$(E - H - \Sigma_S - \Sigma_D) |\psi\rangle = |Q\rangle, \quad (2.15)$$

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

$$\Sigma_S \equiv \tau_S G_S \tau_S^\dagger, \quad (2.16a)$$

$$\Sigma_D \equiv \tau_D G_D \tau_D^\dagger, \quad (2.16b)$$

y la excitación total del nanosistema como

$$|Q\rangle \equiv \tau_S |\Phi_S\rangle + \tau_D |\Phi_D\rangle. \quad (2.17)$$

Y finalmente se puede escribir los estados del sistema como

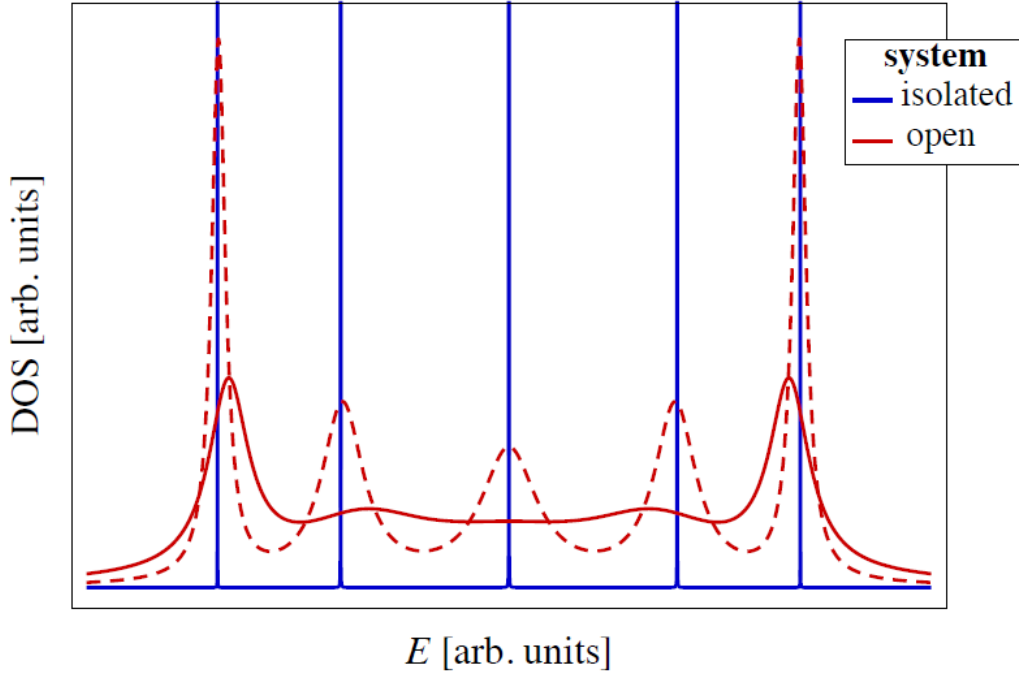


Fig. 2.2: Energía resultantes de la densidad local de estados (DOS) de un nanosistema típico. El DOS de un sistema aislado muestra picos (discretos) para las autoenergías del Hamiltoniano. Los picos sufren un ensanchamiento si sistema se abre cada vez más (de líneas rojas punteadas a líneas rojas sólidas) a los reservorios. Figura tomada de [25, fig. 2.2]

$$|\psi\rangle = G|Q\rangle, \quad (2.18)$$

donde se define la **función de Green del nanosistema** como

$$G \equiv (E - H - \Sigma_S - \Sigma_D)^{-1}. \quad (2.19)$$

Por lo tanto, la ecuación de Schrödinger del sistema acoplado se ha transformado en una sola ecuación para el nanosistema. Este enfoque de inmediato hace que el método sea mucho más sencillo a causa que la dimensión del espacio de Fock del nanosistema es mucho menor que la dimensión del espacio de Fock del sistema acoplado.

Las *autoenergías* en este caso representan una modificación no hermitiana al Hamiltoniano H , que desplaza sus autoenergías del eje real al plano complejo. De este modo, al tomar el Hamiltoniano efectivo del sistema ($H_{ef} = H + \Sigma_S + \Sigma_D$), ahora las eigenenergías son de la forma $\epsilon_k = \epsilon_{ok} + i\gamma_k$; la parte imaginaria de las eigenenergías es inversamente proporcional a la vida útil de los estados en el nanosistema, lo que provoca un ensanchamiento en la DOS del sistema debido al término $e^{-2\gamma t/\hbar}$. En la figura 2.2 se observa el ensanchamiento de la DOS, a causa de los contactos en el sistema. En este caso las autoenergías Σ representan la perturbación del nanosistema.

Se define la matriz de ensanchamiento Γ para la DOS como

$$\Gamma \equiv i(\Sigma - \Sigma^\dagger). \quad (2.20)$$

De esta definición se puede obtener la función espectral del nanosistema como³

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

donde la función espectral $A_{1/2} \equiv G\Gamma_{S/D}G^\dagger$ da la densidad de estados para electrones que se originan en S/D . La función espectral (2.21) no debe confundirse con las funciones $A_{S/D} = i(G_{S/D} - G_{S/D}^\dagger)$ que dan la densidad de estados en los reservorios y no en el nanosistema.

Para calcular la función de correlación G^n se tiene que

$$\begin{aligned} G^n &= |\psi\rangle \langle\psi| = G|Q\rangle \langle Q|G^\dagger \\ &= G\tau_S|\Phi_S\rangle \langle\Phi_S|\tau_S^\dagger G^\dagger + G\tau_D|\Phi_D\rangle \langle\Phi_D|\tau_D^\dagger G^\dagger \\ &\quad + \underbrace{G\tau_S|\Phi_S\rangle \langle\Phi_D|\tau_D^\dagger G^\dagger + G\tau_D|\Phi_D\rangle \langle\Phi_S|\tau_S^\dagger G^\dagger}_{= 0, \text{ por que no existe un acoplamiento entre } S \text{ Y } D}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Al aplicar la sustitución (2.8) y usando la ecuación (2.9) para los reservorios, además asumiendo que se encuentran en equilibrio, se obtiene para la función de correlación fuera del equilibrio para el nanosistema

$$\begin{aligned} G^n &= G \underbrace{\tau_S A_S \tau_S^\dagger}_{\Gamma_S} G^\dagger f(E - \mu_S) + G \underbrace{\tau_D A_D \tau_D^\dagger}_{\Gamma_D} G^\dagger f(E - \mu_D) \\ &= A_1 f(E - \mu_S) + A_2 f(E - \mu_D) \\ &= G\Sigma^{in}G^\dagger, \end{aligned} \quad (2.23)$$

donde se define la *inscattering function*⁴ como

$$\Sigma^{in} = \Sigma_S^{in} + \Sigma_D^{in} = \Gamma_S f_S + \Gamma_D f_D. \quad (2.24)$$

Considerando que los electrones no interactúan entre sí en el nanosistema, la función de correlación del nanosistema da la densidad electrónica, como la suma (2.23) de las funciones espectrales ocupadas por la distribución de Fermi de los contactos correspondientes.

³ La ecuación (2.21) se obtiene usando $i((G^{-1})^\dagger - G^{-1}) = \Gamma_S + \Gamma_D$, multiplicando G por la izquierda y G^\dagger por la derecha.

⁴ La *inscattering function* (2.24) describe como se inyectan los electrones a través de los reservorios.

La ecuación para la función de Green (2.19) y para la función de correlación (2.23) son resultados esenciales para el enfoque de las funciones de Green fuera del equilibrio.

2.4. Corriente para sistemas cuánticos abiertos

Para obtener la corriente por el método de NEGF en un sistema abierto como el que muestra la figura (2.1) (véase la sección anterior), se considera que el operador de proyección $|\psi\rangle\langle\psi|$. Mediante la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo obtenemos la evolución temporal del proyectador como

$$\frac{d}{dt}|\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{i\hbar}[H, |\psi\rangle\langle\psi|] = 0. \quad (2.25)$$

Obsérvese que la ecuación (2.25) tiene la forma de una ecuación de continuidad igual que en la mecánica cuántica, que refleja una conservación de densidad de probabilidad. Dado que el nanosistema esta conectado a los reservorios, los electrones tienen permitido entrar y salir de estos, por lo que la densidad de probabilidad del sistema no se conserva. Considerando que el sistema se encuentra en un estado estacionario, el término temporal de (2.25) se anula y el conmutador proporciona los electrones que entran y salen del sistema. Aplicando la sustitución (2.8), el operador de corriente se define como

$$I^{op} \equiv \frac{ie}{\hbar}[H, |\psi\rangle\langle\psi|] = \frac{ie}{\hbar}[H, G^n], \quad (2.26)$$

donde e es la carga del electrón. Los elementos en la diagonal del operador de corriente son

$$I_{ii}^{op} = \frac{ie}{\hbar} \sum_j (H_{ij}G_{ji}^n - G_{ij}^n H_{ji}), \quad (2.27)$$

e indican la corriente total que fluye al i -ésimo sitio. Por lo tanto, los términos individuales de la suma en la ecuación (2.27) se pueden identificar como la corriente total local que fluye entre el sitio i -ésimo y el j -ésimo,

$$I_{ij}^{op} = \frac{ie}{\hbar}(t_{ij}G_{ji}^n - t_{ji}G_{ij}^n) = \frac{2e}{\hbar}\text{Im}(t_{ij}^*G_{ij}^n). \quad (2.28)$$

El **flujo total de electrones** con energía E a través de la elipse punteada de la figura 2.1 viene dado por⁵

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

Se observa que el número de electrones se conserva, dado que el número de electrones que entra es el mismo número que salen, por lo que al fijarse en la definición del operador de corriente (2.26) el flujo total de electrones a través del nanosistema es exactamente cero. De esta forma, para aislar la corriente que llega al drenaje I_D (corriente diferente de cero), basta con separar la *in-scattering function* y la función de ensanchamiento en las contribuciones individuales de cada contacto, se obtiene que la corriente en el drenaje es

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

La ecuación anterior es un resultado clave del método de funciones de Green fuera del equilibrio NEGF. Integrando esta ecuación sobre la energía, se llega a la formula conocida de Landauer para la corriente total a través del sistema [32, 33]

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

donde se define la *función de transmisión*

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

La función de transmisión T_{DS} da la probabilidad de que un electrón inyectado por la fuente S se transmita al drenaje D , y también depende con la energía E que fue inyectado el electrón. En un sistema aislado, la transmisión es perfecta, en sus eigenenergías $T_{DS} = 1$, mientras que para otros valores se desvanece.

⁵ Otra forma de escribir el operador de corriente es

$$\begin{aligned} [H, G^n] &= H G \Sigma^{in} G^\dagger - G \Sigma^{in} G^\dagger H \\ &= G \Sigma^{in} - \Sigma^{in} G^\dagger + G \Sigma^{in} G^\dagger \Sigma^\dagger - \Sigma G \Sigma^{in} G^\dagger \end{aligned}$$

donde $\Sigma = \Sigma_S + \Sigma_D$ y $\Gamma = \Gamma_S + \Gamma_D$. Usando (2.20) y (2.21) y la invariancia de la traza ante permutaciones cíclicas, se obtiene la última igualdad.

2.4.1. Conductancia y resistencia

Se estudia el transporte de electrones en el límite de un voltaje infinitesimal a temperatura cero, es decir, $\mu_S \rightarrow \mu_D = \mu$. En este caso la función de transmisión al situarse en la energía de Fermi da directamente la conductancia,

$$\mathcal{G} = \frac{e^2}{h} T_{DS}(E = \mu). \quad (2.33)$$

El factor e^2/h que multiplica la función de transmisión en la conductancia; esté factor puede multiplicarse por un factor de 2, si se supone la degeneración del espín. Dada la definición de la conductancia, como consecuencia se define la resistencia como la inversa de (2.33) en el valor de la energía de Fermi como

$$\mathcal{R} = \frac{h}{e^2} \frac{1}{T_{DS}(E = \mu)}. \quad (2.34)$$

Fosforeno

Este capítulo este dedicado al seguimiento de las propiedades y características electrónicas del Fosforeno, partiendo de la descripción del modelo de amarre fuerte a los primeros vecinos que se expone en [34, 35]. Además, se expone que debido al tipo de estructura de este material, el Fosforeno posee un alto carácter anisótropico; que causa que los electrones se comporten en una dirección como Fermiones de Dirac masivos, mientras que en la dirección ortogonal como electrones de Schrödinger. Se introduce el efecto Hall, que se explica para campos magnéticos débiles en términos clásicos, mientras para campos fuertes el fenómeno se explica mediante el régimen cuántico. Finalmente se presenta una descripción de los contactos usados en los cálculos numéricos presentados en esta tesis. También, se presenta una descripción detallada de como se inyectan los electrones mediante el contacto de la fuente de inyección en la nanocinta por uno de sus bordes, y en el caso contrario cuando los electrones son recolectados por el drenaje.

3.1. Características del Fosforeno

El Fosforeno es un material que está compuesto por átomos de Fósforo, donde la red tiene la estructura de *panal de abeja corrugada*, como se muestra en la figura 3.1. Debido a que la estructura electrónica del Fósforo en el estado basal, $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$, los orbitales $3s$ y $3p$ contienen 5 electrones de valencia; aún más, el orbital $3p$ contiene tres electrones no apareados. Sin embargo, el Fosforeno puede maximizar el número de enlaces para reducir la energía del sistema, por lo que reorganiza los electrones de valencia de tal manera que los lleva a un estado excitado; esto a pesar de que el orbital $3s$ está completo. Esto da lugar a una hibridación entre los orbitales $3s$ y $3p$, que para el caso del Fosforeno genera orbitales híbridos sp^3 (combinando los orbitales s , p_x , p_y y p_z), donde uno de los orbitales alberga un par de electrones libres mientras que el resto de los orbitales alberga un electrón de valencia [35-37]. Por un lado, se combinan los orbitales s , p_x , p_y y p_z y producen orbitales sp^3 , los cuales sólo albergan un electrón y se traslapan a primeros vecinos formando enlaces frontales denominados enlaces tipo σ (enlazante) o σ^* (antienlazante).

3. FOSFORENO

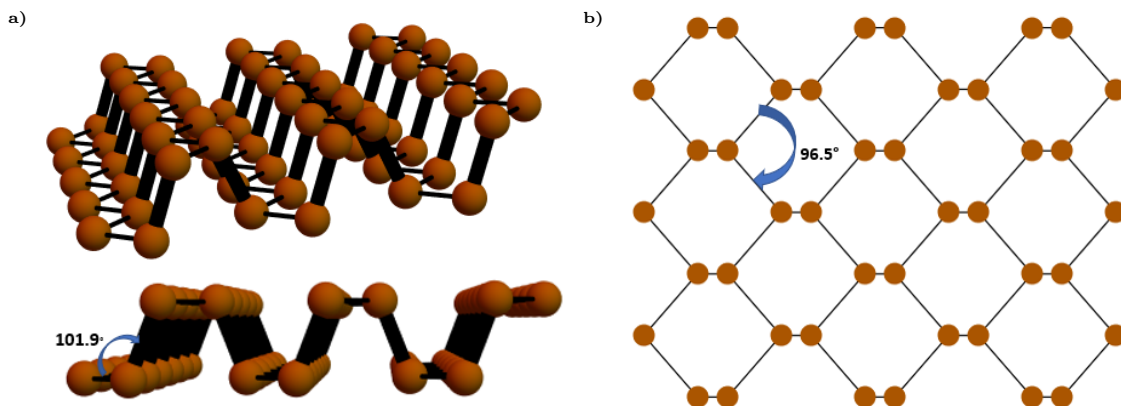


Fig. 3.1: Se muestra la estructura de los átomos en el Fosforeno. En **a)** se observa una vista tridimensional desde dos perspectivas diferentes. Mientras que en **b)** se muestra una proyección de los átomos en el plano $x - y$.

En contraste con otros materiales bi-dimensionales atómicamente planos (como el grafeno), el Fosforeno se puede presentar como una monocapa ondulada o corrugada, donde las cadenas de átomos de Fósforo están unidos mediante enlaces covalentes que se encuentran en dos planos diferentes; esto debido a los orbitales sp^3 . El ángulo que forman entre sí los átomos que se encuentran en el mismo plano es de aproximadamente de 96.5° , mientras que el enlace que esta orientado fuera del plano (en dirección casi perpendicular al plano de los enlaces anteriores) es de 101.9° . Debido a estos ángulos entre orbitales se da la estructura de red de panal corrugada o modificada. Aquel orbital que alberga el par de electrones se encuentra a un costado de los otros orbitales [35, 36, 38], para terminar de formar la estructura tetraédrica por la hibridación sp^3 . Véase la figura 3.2, donde se muestra la posición de los orbitales de un átomo en Fosforeno y la formación de los orbitales a vecinos mas cercanos.

Debido a la hibridación sp^3 , la estructura de red del Fosforeno se presenta como una capa ondulada o corrugada con un espesor aproximadamente de 5 \AA [2, 35]. En la figura 3.3 a) se muestra una vista 3D de una capa de Fosforeno. En la figura 3.3 b) se presenta una vista lateral de una capa de Fosforeno, donde se muestran los orbitales que albergan un par de electrones libres por cada átomo de Fósforo. La figura 3.3 c) muestra los enlaces covalentes que se forman entre los átomos de Fósforo.

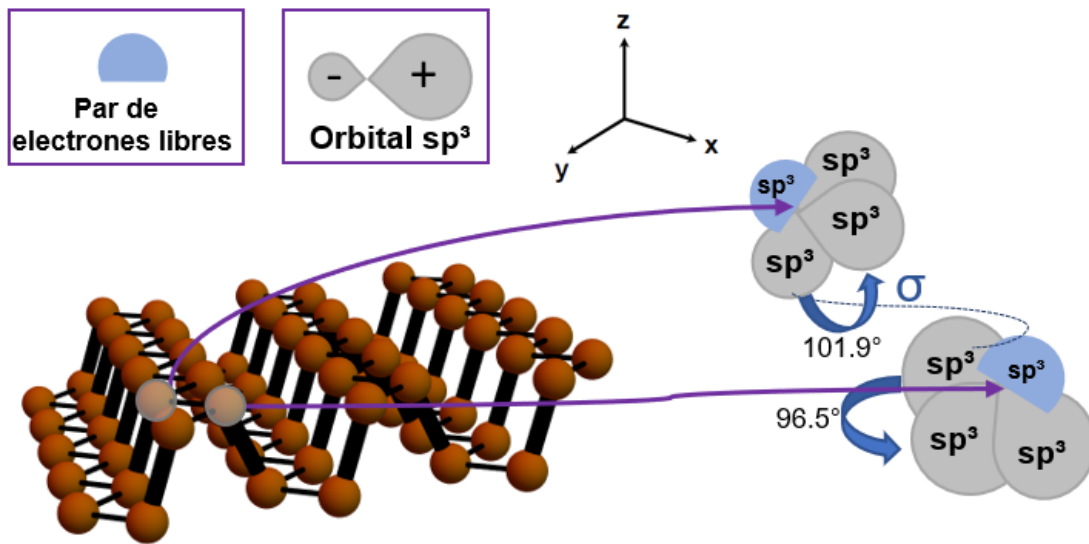


Fig. 3.2: Orbitales para los átomos del Fosforeno. Dos de los orbitales sp^3 se mantiene en el mismo plano, con un ángulo entre ellos de 96.5° , mientras que para un tercer orbital que se orienta casi perpendicular al plano de los dos anteriores forma un ángulo de 101.9° . El traslape de los orbitales sp^3 forman enlaces tipo σ (por la hibridación de los orbitales s , p_x , p_y y p_z), donde uno de estos orbitales alberga un par de electrones libres que se encuentran a un costado [35]. En el primer recuadro se presenta la forma del orbital que contiene el par de electrones libres. En el segundo recuadro se presenta la forma del orbital híbrido sp^3 .

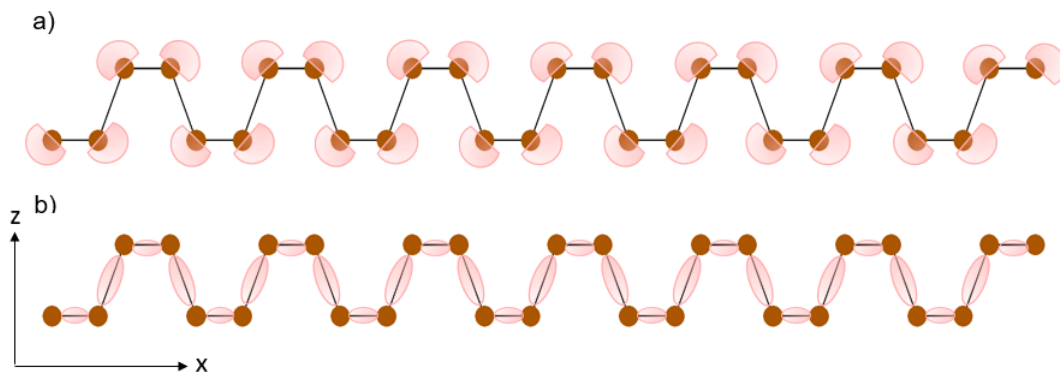


Fig. 3.3: Orbitales del Fosforeno desde una perspectiva lateral. Dichos orbitales se muestran en color rosa. En las figuras 3.3 a) y 3.3 b) se presenta la vista lateral de una capa de Fosforeno, correspondiente a los orbitales de enlace. En a) se muestra los orbital que albergan el par de electrones libres. En b) se presenta los orbitales correspondientes a la hibridación sp^3 . El cálculo de los orbitales se da en términos de las funciones de Wannier. [35, 39, 40].

3.1.1. Red del Fosforeno

La red del Fosforeno como se presenta en la figura 3.1 a) (teniendo en cuenta la *corrugatura*), este sistema se puede describir matemáticamente por vectores de una base ortogonal¹ (**a** y **b**), que tienen una longitud de 4.42 \AA y 3.27 \AA , respectivamente [34]; estos vectores se muestran en la figura 3.4 a). Al trabajar con la base ortogonal, la celda unitaria queda compuesta por cuatro

¹ Los vectores en la base ortogonal se definen como $\mathbf{a} = (a, 0)$ y $\mathbf{b} = (0, b)$.

3. FOSFORENO

átomos de Fósforo. Así, a partir de los vectores de la red real, se puede obtener los vectores de la red recíproca para el Fosforeno.

Por otra parte el Fosforeno también se puede entender como un grafeno deformado, proyectando los átomos en el plano $x - y$ (despreciando la corrugatura), una red hexagonal deformada, comúnmente conocida como red de panal de abeja corrugada, como se muestra en la figura 3.4 b). El sistema se puede describir matemáticamente por vectores de una base trigonal con una celda unitaria con sólo dos átomos conectados por el vector δ de longitud 0.8 \AA ; cada átomo en la celda unitaria forma una subred triangular, como se observa en la figura 3.4; donde los átomos morados forman una subred α y los anaranjados una subred β . Desde este punto de vista, se puede apreciar que el Fosforeno es muy similar al grafeno con la red hexagonal deformada. Sin embargo, la clara diferencia se encuentra en los parámetros de enlace a vecinos mas cercanos ($t_2 \approx -3t_1$), que es la principal causa de las peculiares propiedades que se presentan en el Fosforeno (véase figura 3.4).

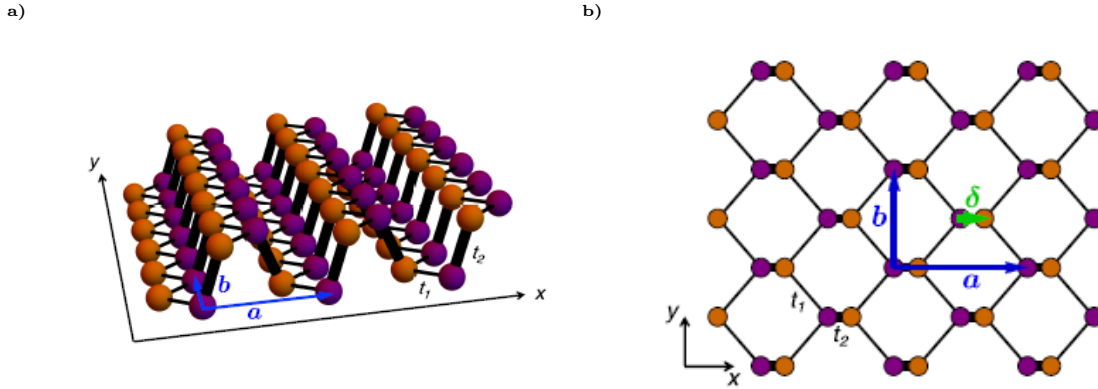


Fig. 3.4: Vectores de la celda unitaria y parámetros de acoplamiento en el Fosforeno. En la figura 3.4 a) se muestra la estructura cristalina del Fosforeno. Su estructura electrónica está modelada por el hamiltoniano de amarre fuerte que solo tiene en cuenta al primer (t_1) y segundo ($t_2 \approx -3t_1$) vecinos, más cercanos. Los vectores \mathbf{a} y \mathbf{b} abarcan la parte de la celda unitaria que se proyecta sobre el plano $x - y$. En 3.4 b) se hace la proyección de todos los átomos en el plano $x - y$, mostrando que el Fosforeno también se puede entender como una red trigonal deformada con base diatómica. Los átomos de color morado y naranja forman una subred triangular de forma independiente. El vector δ conecta estos dos átomos de la celda unitaria. Figura tomada de [34, fig. 1a) y 1b)].

En la figura 3.5 se muestra la (primera) zona de Brillouin (ZB) con los vectores de la red recíproca². Obsérvese que la red recíproca muestra los puntos de alta simetría para esta estructura alrededor del punto Γ , los cuales son de gran consideración para el cálculo de la estructura de bandas del Fosforeno [35, 41-43].

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

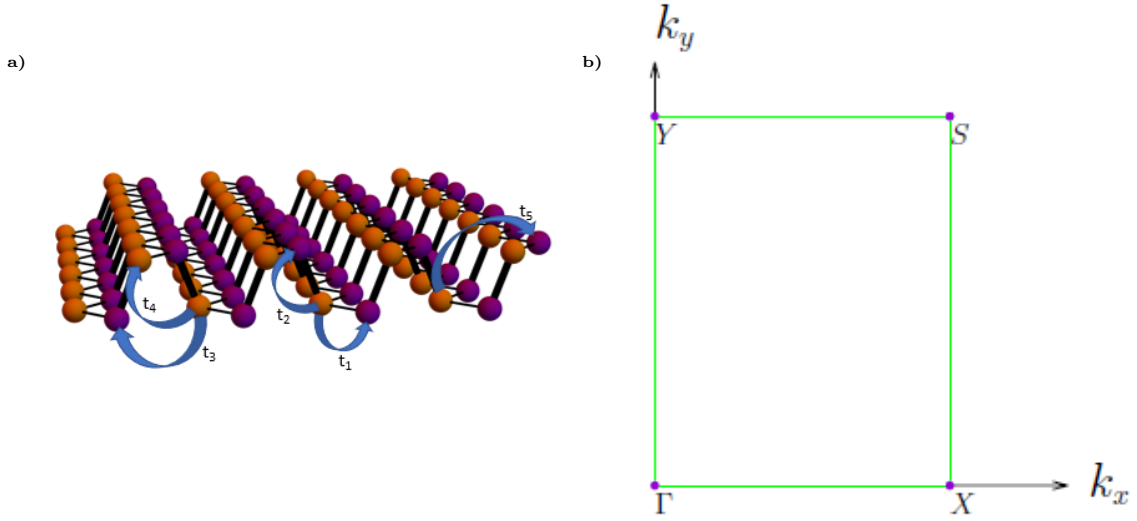


Fig. 3.5: Parámetros de acoplamiento y ZB del Fosforeno. En **a)** se presenta la estructura cristalina así como los parámetros de acoplamiento a primeros vecinos (t_i , con $i = 1, 2, \dots$) que describe el modelo de amarre fuerte [35, 38]; para el estudio de esta tesis el hamiltoniano de amarre fuerte solo considera t_1 y t_2 . En **b)** se muestra la ZB para el Fosforeno, que también es una base rectangular en el espacio de momentos. Presenta los puntos de alta simetría alrededor del punto Γ , de gran consideración para la estructura de banda del Fosforeno. Figura **b)** tomada de [42, fig. 4.4].

3.1.2. Hamiltoniano del Fosforeno

Para simplificar los cálculos, tomamos los primeros dos (t_1 y t_2) parámetros de acoplamiento, como se muestra en la figura 3.4. Por otro lado, es sencillo observar que los primeros vecinos de un átomo de la subred α (β) son parte de la subred β (α). Al tener en cuenta que se hace la descripción de amarre fuerte a primeros vecinos y que para el transporte cuántico en Fosforeno solo se considera el orbital sp^3 que alberga el par de electrones libres. Partiendo de la ecuación (2.1) se tiene que el Hamiltoniano para el Fosforeno está dado por (mismo que se expone en [34, 44])

$$H = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{i,j} t_{ij} |i\rangle \langle j| + \text{H.c.}, \quad (3.1)$$

en donde $|i\rangle$, $|j\rangle$ representan los estados atómicos localizados (orbitales que albergan un par de electrones libres) en los átomos de Fósforo en las posiciones r_i . La suma corre sobre los índices i, j sobre todos los sitios de la nanocinta de Fosforeno, que incluye los primeros y segundos vecinos más cercanos (modelo simple de amarre fuerte); están acoplados por las energías $t_1 = -1.22$ eV y $t_2 = 3.665$ eV, respectivamente [34, 35, 38]. Debido a que se trabaja con nanocintas de Fosforeno no dopado, el primer término de la ecuación (2.1) es cero³. Este modelo de amarre fuerte se entiende fácilmente al proyectar todos los átomos en el plano $x - y$, manteniendo los parámetros de acoplamiento constantes; obsérvese la figura 3.4 b).

³ Debido a que el término $\varepsilon_i = 0$; en todos los sitios de la nanocinta.

3.1.3. Propiedades electrónicas de las nanocintas del Fosforeno

La estructura cristalina del Fosforeno se muestra en la figura 3.5 a), a un lado un esquema de la primera zona de Brillouin donde se resaltan los puntos de alta simetría. Por lo tanto, para obtener (la energía en función del momento en el espacio recíproco) el espectro de energético del Fosforeno homogéneo, es decir, $\varepsilon_i = 0$, se busca encontrar una solución para la ecuación de Schrödinger. De acuerdo al *teorema de Bloch*, la eigenfunción evaluada en la red periódica dado las posiciones \mathbf{R}_i y \mathbf{R}_j difieren por un factor de fase $e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)}$. A pesar de que la celda unitaria contiene 4 átomos en su interior, lo que significa que la matriz Hamiltoniana es de dimensión 4×4 , esta matriz se puede simplificar aún más mediante argumentos simétricos, ya que es posible acoplar las funciones de onda de los átomos que están conectados por el vector $\boldsymbol{\delta}$ (átomos que se encuentran en distintos planos) lo que lleva a una base de dos componentes. Teniendo en cuenta está última consideración, se hace el *ansatz* [36, Ec. (9)]

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} \left(C_\alpha |P_m^\alpha\rangle + C_\beta |P_m^\beta\rangle \right), \quad (3.2)$$

donde $|P_m^{\alpha/\beta}\rangle$ es el estado normalizado (por el número de celdas unitarias) en el m -ésimo sitio de la red en una celda unitaria, es decir, que \mathbf{R}_m es un punto en la red del Fosforeno. Así, α y β denotan átomos para cada subred del Fosforeno en la misma celda unitaria y $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ es el vector de onda, que se limita a la ZB. Al considerar que los orbitales cercanos no se superponen, entonces se cumple $\langle P_i^\alpha | P_j^\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij}$. Así, usando la relación de ortogonalidad en la ecuación de Schrödinger, se puede escribir el Hamiltoniano de amarre fuerte como

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & g^*(k) \\ g(k) & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Al considerar los primeros dos vecinos más cercanos como ya se menciona anteriormente se tiene que [34]

$$g(k) = e^{ik_\delta} \left[t_2 + 2t_1 e^{ik_a/2} \cos\left(\frac{k_b}{2}\right) \right], \quad (3.4)$$

con $k_\delta = \mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}$, $k_a = \mathbf{k}\cdot\mathbf{a}$ y $k_b = \mathbf{k}\cdot\mathbf{b}$. De esta manera, la relación de dispersión energética se obtiene al diagonalizar la matriz correspondiente al Hamiltoniano en (3.3), haciendo el determinante igual a cero. Este Hamiltoniano está bien estudiado en el caso del grafeno [37, 45, 46]. Así, las eigenenergías correspondientes son [34, 36, 44]

$$E(\mathbf{k}) = s|g(\mathbf{k})| = s\sqrt{t_2^2 + 4t_1t_2 \cos\left(\frac{k_a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_b}{2}\right) + 4t_1^2 \cos^2\left(\frac{k_b}{2}\right)}, \quad (3.5)$$

donde $s = \text{sgn}(E) = \pm 1$, el signo positivo (negativo) hace referencia a la banda de conducción

(valencia) [47]. En la figura 3.6 se muestra la relación de dispersión energética para la ZB. Con esta relación de dispersión se muestra una brecha de banda intrínseca de $\Delta = 2t_1 + t_2 \approx |t_1| = 1.22$ eV en el centro de la ZB (alrededor del punto Γ) y una fuerte anisotropía. Y las eigenfunciones correspondientes a (3.3) se escriben como

$$\Psi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\psi(k)} \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (3.6)$$

con la fase (o *pseudospin*)

$$\phi(k) = \arctan \left(\frac{\text{Im}[g(k)]}{\text{Re}[g(k)]} \right) = \arctan \left(\frac{\lambda_1(k) \cos(k_\delta) - \lambda_2(k) \sin(k_\delta)}{\lambda_2(k) \cos(k_\delta) + \lambda_1(k) \sin(k_\delta)} \right) \quad (3.7)$$

donde $\lambda_1(k) = 2t_1 \sin(k_a/2) \cos(k_b/2)$ y $\lambda_2(k) = t_2 + 2t_1 \cos(k_a/2) \cos(k_b/2)$. El concepto de fase hace referencia al pseudospin, ya que caracteriza la proyección de la función de onda en las dos subredes del Fosforeno.

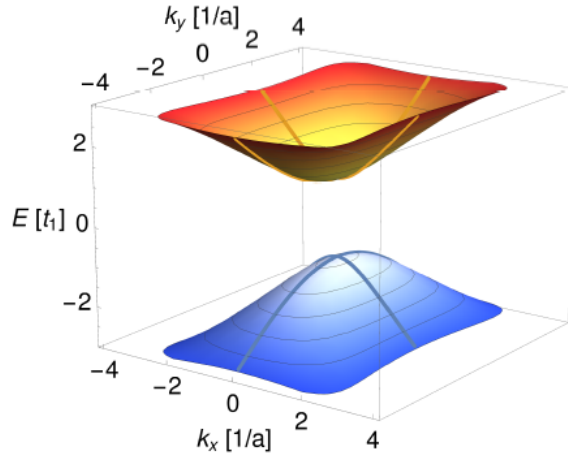


Fig. 3.6: Relación de dispersión energética (3.5) para la primera BZ del Fosforeno. Se muestra la estructura de banda electrónica. Presenta una brecha intrínseca de $\Delta \approx |t_1| = 1.22$ eV, alrededor del punto Γ y una fuerte anisotropía para las dos direcciones cristalinas de alta simetría. Figura tomada de [34, Fig. 1c]

3.1.4. Anisotropía y masas efectivas en Fosforeno

En el estudio de la fuerte anisotropía que posee el Fosforeno se enfoca con especial interés alrededor del punto Γ . Esta propiedad se observa más claramente si el Hamiltoniano (3.3) se expande alrededor del punto Γ , obteniendo

$$H_{eff} = \sigma_x \left(\Delta + \frac{P_x^2}{2m_x} + \frac{P_y^2}{2m_y} \right) + \sigma_y v P_x, \quad (3.8)$$

donde $m_x = 2/(-t_1 a^2 + 2\delta(2at_1 - \delta\Delta))$ y $m_y = 2/(t_1 b^2)$ son las masas anisotrópicas y $v_x = at_1 - \delta\Delta$ la velocidad a lo largo de la dirección x . A diferencia del grafeno, donde los conos de Dirac se encuentran en los 6-puntos \mathbf{K} [46], la brecha en el Fosforeno extendido en todas las direcciones se encuentra en el punto Γ , en el centro de la zona de Brillouin. Por lo tanto, considerando el Hamiltoniano (3.8) la energía de bandas toma la forma

$$E = \sqrt{\left(\Delta + \frac{P_x^2}{2m_x} + \frac{P_y^2}{2m_y}\right)^2 + v^2 P_x^2}, \quad (3.9)$$

donde esta ecuación muestra con mayor claridad el comportamiento híbrido de los electrones en las dos diferentes direcciones cristalinas de alta simetría [47, cáp. 21]. Por otra parte, el estudio del flujo local de corriente, LDOS y del efecto Hall cuántico que se llevan a cabo en esta tesis toma en cuenta la aproximación a bajas energías. Así la relación de dispersión energética (3.9) se puede simplificar aún más, teniendo en cuenta que para tales energías es de la forma cuadrática en ambas direcciones [34]

$$E \approx \Delta + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2\mu_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y}; \quad (3.10)$$

es importante observar que la masa a lo largo de la dirección x se cambia por la masa efectiva definida como $\mu_x = \frac{m_x}{1+m_x v^2/\Delta}$, ya que más adelante toma un rol importante. Esta última ecuación puede reescribirse como

$$\frac{k_x^2}{l_x^2} + \frac{k_y^2}{l_y^2} = 1, \quad (3.11)$$

donde $l_x^2 = 2\mu_x(E - \Delta)/\hbar^2$ y $l_y^2 = 2m_y(E - \Delta)/\hbar^2$, son las longitudes cuadradas de los semiejes de una elipse.

Las propiedades electrónicas alrededor del punto Γ en la ZB, si $P_y = 0$, imitan a las propiedades que tienen los fermiones masivos (o de Dirac) con una *velocidad de Fermi* de

$$v_F = \sqrt{v^2 + \Delta/m_x} \quad (3.12)$$

y una masa en reposo de

$$m_0 = \Delta/v_F. \quad (3.13)$$

La relación de dispersión de los electrones cuando $P_y = 0$ es de forma cuadrática para bajas energías, seguido de un régimen lineal debido al valor específico de las masas efectivas. Obsérvese la figura 3.7 b). Por otra parte, si $P_x = 0$ los electrones tienen una dispersión tipo parabólica comportándose como electrones no-relativistas de Schrödinger; este comportamiento

se muestra en la figura 3.7 a).

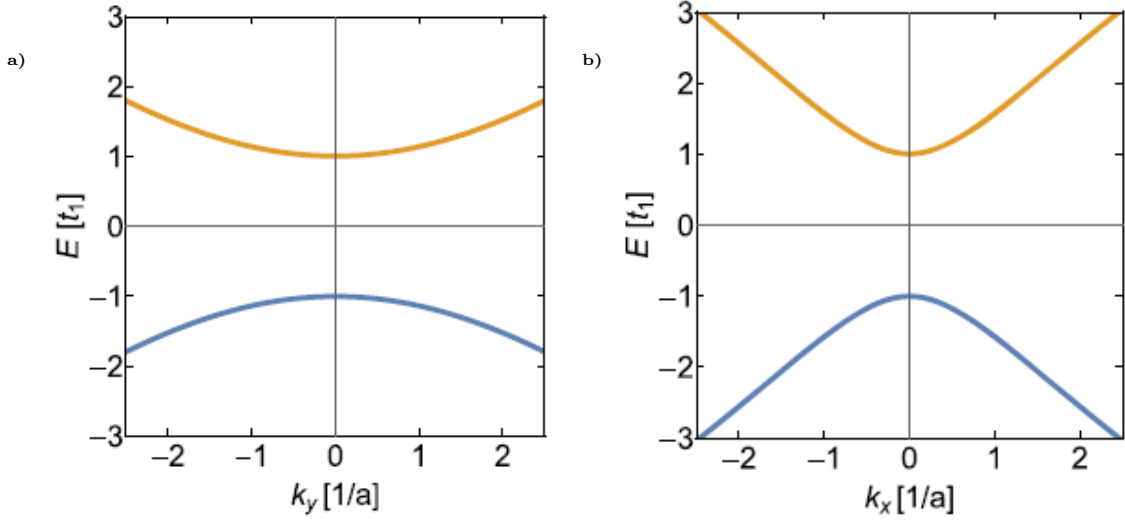


Fig. 3.7: Se presenta la relación de dispersión energética de la estructura de la banda electrónica de la figura 3.6, desde la perspectiva de las dos direcciones cristalinas. En **a)** se despliega una dispersión parabólica de los electrones de Schrödinger en la dirección \mathbf{k}_y . En **b)** se muestra una dispersión cuadrática a bajas energías seguido de un régimen lineal para electrones masivos de Dirac en la dirección \mathbf{k}_x . Figura tomada de [34, fig. 1d) y 1e)]

El comportamiento de la estructura de banda electrónica para el Fosforeno se despliega en las figuras 3.6 y 3.7. De esta manera se muestra que el modelo TB para los primeros dos vecinos más cercanos describe bien las propiedades electrónicas esenciales del Fosforeno a bajas energías, es decir, presenta una brecha de banda intrínseca y un fuerte carácter anisotrópico. Al tomar en cuenta un modelo con órdenes más altos, causa una modificación en el tamaño de la brecha de banda, pero no cambia cualitativamente la forma de la estructura electrónica (a bajas energías) de banda, la cuál será la base de estudio en esta tesis.

3.2. Contactos en Nanocintas de Fosforeno

En la sección 2.2 y 2.4 sólo se trato el nanosistema cuando se conecta a los dos reservorios (contactos), una fuente y un drenaje (S y D), imprescindible para generar el transporte electrónico en el Fosforeno. A continuación, se presenta la descripción para realizar el cálculo del flujo de corriente en la nanocinta de Fosforeno, es decir, el nanosistema; cuando se conectan más de dos reservorios.

3.2.1. Extensión del método de NEGF a varios contactos

En la sección 2.2 se presenta el caso cuando el nanosistema se conecta a dos contactos. Ahora bien, al conectar más de dos contactos al nanosistema, los contactos suplementarios se pueden tratar como terminales reales de voltaje o como reservorios virtuales que describen interacciones con el nanosistema con variables externas (autoenergías), como se expone en [25]. El estudio del transporte cuántico en nanocintas de Fosforeno en esta tesis, se colocan los contactos

en diferentes posiciones a lo largo de los bordes de la nanocinta. El tamaño de los contactos no es el mismo en todas las simulaciones, para cada una se da detalle de esto; obsérvese la figura 3.8. Los contactos 1 y 2 se pueden dividir en otros sub-contactos y el conjunto total de éstos forma el contacto total.

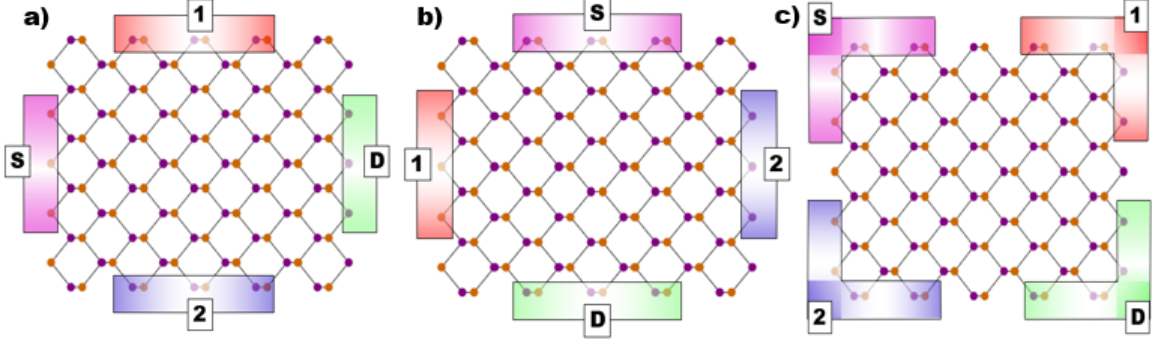


Fig. 3.8: Se muestra las diferentes posiciones de los contactos utilizados para los cálculos numéricos del flujo de corriente, la LDOS y la resistencia de Hall. Se ha colocado nombre de cada uno de los contactos, S para el contacto de inyección, D el contacto que recolecta los electrones. Los nodos de la red que se conectan a cada uno de los contactos correspondientes, estos sitios son los que se toman en cuenta para la matriz de acoplamiento τ_i de cada contacto. En **a)** se muestra la fuente y el drenaje al borde de una estructura tipo *Armchair*. En **b)** están ubicados en los bordes de una estructura de tipo *Zigzag*, mientras que en **c)** se presenta una combinación de los contactos de una estructura tipo *Armchair* como *Zigzag*.

Ahora, se debe de tener en cuenta que el nanosistema esta conectado a los contactos S , D y en este caso a los contactos 1 y 2; como se muestra en la figura anterior (es posible conectar al nanosistema con más de estos contactos). Por otro lado, obsérvese la figura 2.1 en donde el nanosistema se encuentra conectado a n contactos donde $n \in S, D, P_1, P_2, P_3$. Para cada uno de éstos se tiene un potencial químico μ_i y una matriz de acoplamiento τ_i , con $i \in \mathcal{C} := S, D, 1, 2, \dots, N$. Retomando con el desarrollo de la subsección 2.3 de las funciones de Green para sistemas cuánticos abiertos, entonces cada contacto que se encuentra conectado al nanosistema perturba al nanosistema causando que se encuentra fuera del equilibrio. Así, la función de Green del nanosistema abierto es

$$G := (E - H - \bar{\Sigma})^{-1}, \quad (3.14)$$

donde $\bar{\Sigma} := \sum_{i \in \mathcal{C}} \Sigma_i$, siendo Σ_i la autoenergía de cada reservorio, para una descripción más detallada véase Datta [26]. Por lo tanto, la función de correlación (2.23) se mantiene y la *in-scattering function* se define como

$$\Sigma_{in} := \sum_{i \in \mathcal{C}} \Sigma_i^{in}, \quad (3.15)$$

donde Σ_i^{in} esta definido como

$$\Sigma_i^{in} := \Gamma_i f_i. \quad (3.16)$$

Por otra parte, para el cálculo de la corriente (resuelta en energía) en el nanosistema cuando esta conectado a múltiples contactos, se tiene que sumar las contribuciones de todos los reservorios (como lo hace el contacto fuente en el drenaje en (2.30)); se debe de considerar que cada contacto conectado al nanosistema puede generar falsas reflexiones. Para finalmente, obtener la fórmula de *Landauer-Büttiker* [48, 49]

$$I_i(E) = \frac{e}{h} \sum_{\substack{j \in \mathcal{C} \\ j \neq i}} T_{ij}(f_j - f_i), \quad (3.17)$$

con f_i como la distribución de energía en cada uno de los contactos y T_{ij} es la transmisión del contacto j al contacto i y se define como:

$$T_{ij} := \text{Tr}(\Gamma_i G \Gamma_j G^\dagger). \quad (3.18)$$

Para los contactos S y D , les corresponde la distribución de Fermi con potencial químico y voltaje dados. Para los contactos adicionales, la función de distribución se encuentra determinada por la condición de que la corriente total en estos reservorios se desvanece. Esta condición se aplica tanto a terminales reales de voltaje como a reservorios virtuales (existentes solo conceptualmente). Considerando lo anterior, al aplicar la fórmula de Landauer-Büttiker (3.17), se obtiene un sistema de ecuaciones lineales para las funciones de distribución de energía desconocidas hasta ahora [25, 27]:

$$\sum_{j \in \mathcal{C}_N} \mathcal{T}_{ij}(f_j - f_D) = T_{iS}(f_S - f_D), \quad (3.19)$$

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

$$\mathcal{T}_{ij} = \mathcal{R}_{ij}^{-1} := \begin{cases} -T_{ij} & i \neq j, \\ \sum_{\substack{k \in \mathcal{C} \\ k \neq i}} T_{ik} & i = j. \end{cases} \quad (3.20)$$

Entonces, la corriente a través del nanosistema está dado por

$$I_D(E) = \frac{e}{h} \left[T_{DS} + \sum_{i, j \in \mathcal{C}} T_{Di} \mathcal{R}_{ij} T_{iS} \right] (f_S - f_D). \quad (3.21)$$

Así, las sumas en (3.19) y (3.21) corresponde a los reservorios con una función de distribución energética desconocida, mientras la suma en (3.20) es sobre todos los reservorios, incluidos la fuente S y el drenaje D . Las ecuaciones anteriores reflejan la Ley de Kirchhoff para una de red de resistencias cuánticas, $1/T_{ij}$.

3.2.2. Contactos de Banda Ancha

Las eigenenergías de los contactos en las nanocintas de Fosforeno perturban al sistema, como antes ya se mencionó. Por lo que el modelo que comúnmente se utiliza, y que además se aplica para las simulaciones realizadas en esta tesis, es el modelo de *aproximación de banda ancha* (WB, *wide-band*), donde las eigenenergías de estos reservorios son meramente imaginarias. Por lo tanto, la eigenenergía de banda ancha se expresa mediante

$$\Sigma_{WB} := -i\eta \sum_{n \in M} |n\rangle \langle n| \quad (3.22)$$

donde η es una constante mayor que cero y positiva, M representa los nodos de la nanocinta que se encuentran conectados al reservorio, obsérvese la figura 3.8. Las eigenenergías corresponden a una LDOS constante en la superficie del reservorio, que es en particular una aproximación razonable cuando se trabaja con voltajes infinitesimalmente pequeños y las energías en el rango de la energía de Fermi [50]. Este modelo se introduce con mayor detalle en [25, cáp. 3]. Además una ventaja de usar el modelo de aproximación de banda ancha es que el costo computacional es mucho menor comparado con el modelo de cintas semi-infinitas o cálculos de DFT [25, cáp. 3].

3.2.3. Contactos en las simulaciones

Además de los contactos indispensables, la fuente y el drenaje (S y D), los cuales son colocados en los distintos bordes en el nanosistema de Fosforeno, en este caso se utilizan dos contactos más (contacto 1 y contacto 2). Son los encargados de cumplir con la función de suprimir los efectos de borde, donde se encuentran ubicados. Estos contactos adicionales se han modelado con un potencial complejo, para cumplir con dicha intención. Así de esta manera, al manipular los contactos 1 y 2, se puede suprimir estos efectos en los bordes del nanosistema, en donde se desea. De esta manera, se puede hacer un estudio de la corriente local y de la LDOS, considerando ambos casos. Mientras que en el efecto Hall la función de los contactos adicionales se utilizan para medir el voltaje U_{12} .

En la figura 3.8 se muestra la posición de los cuatro contactos básicos en diferentes ubicaciones en los bordes de la nanocinta de Fosforeno, que son utilizados en los cálculos de la corriente y de la resistencia de Hall [51]. Las distintas posiciones de los contactos son utilizados más adelante para mostrar la fuerte anisotropía que posee el Fosforeno. A menos que en el texto se mencione un cambio en los contactos S , D , 1 y 2, se considerarán las diferentes posiciones de los contactos de esta figura.

3.3. Bases y principios del efecto Hall cuántico

Debido a la peculiar estructura electrónica que se discutió en éste capítulo, la cuál muestra una brecha de banda intrínseca y una fuerte anisotropía a lo largo de los dos direcciones cristalinas; es de gran interés estudiar el magnetotransporte en nanocintas de Fosforeno y sus propiedades básicas. Este análisis se realiza numéricamente mediante el método de NEGF. Se estudia el magnetotransporte a lo largo de los bordes de las nanocintas de Fosforeno. En particular, como cambian las propiedades del sistema cuando aumenta la intensidad del campo magnético, se estudian dos regímenes de campos magnéticos; para campos magnéticos débiles, el flujo de electrones se puede describir en términos clásicos, mientras en campos magnéticos fuertes, se puede observar el efecto Hall cuántico.

Para comprender de mejor manera los fenómenos que implica éste último efecto (la cuantificación de la resistencia y el transporte de corriente por estados de borde), se realiza una breve introducción de los principios básicos del efecto Hall cuántico, que se basa en [26, 52, 53]. Considerando el nanosistema, como se muestra en la figura 3.9, cuando los electrones se inyectan a través de la fuente S en el borde del sistema y éstos son afectados por un campo magnético perpendicular \mathbf{B} al borde contrario del nanosistema, las trayectorias que presentan son descritas en el régimen clásico⁴. Cuando se presentan campos magnéticos fuertes, se despliega el efecto Hall cuántico, que se explica a partir del transporte de electrones a través de estados de borde a lo largo de los bordes del nanosistema. Obsérvese las líneas rojas en la figura 3.9.

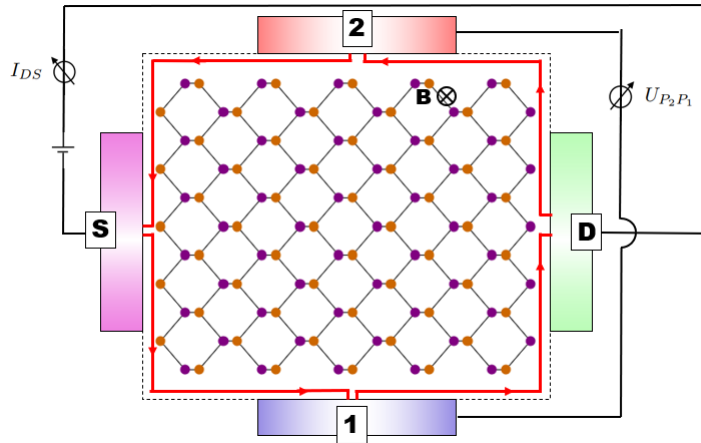


Fig. 3.9: En el diagrama, se presenta una configuración de como están colocados los contactos (Fuente, Drenaje, Contacto 1 y Contacto 2) en los diferentes bordes a largo del Fosforeno. Ver sección 3.2) de los contactos utilizados en los cálculos de NEGF. Los electrones son inyectados por la fuente S y afectados por un campo magnético perpendicular \mathbf{B} aterrizado sobre el voltaje P_1 . Se hace el cálculo de la corriente I_{SD} entre la fuente y el drenaje, así como el voltaje de caída $U_{P_2 P_1}$ entre las sondas de voltaje P_1 y P_2 . Utilizando estas cantidades, se estudia la resistencia de Hall generalizada (resistencia transversal) $R_{xy} = U_{P_2 P_1} / I_{SD}$ en función del campo magnético \mathbf{B} . El transporte por los estados de borde del efecto Hall cuántico en campos magnéticos fuertes se indica con flechas rojas.

⁴ Se observan resonancias cuando un múltiplo del diámetro del ciclotrón es igual a la distancia entre el contacto de inyección y el drenaje. Un estudio más profundo se realiza en [25, cap. 5].

Se hace la suposición experimental de que la influencia de la temperatura es insignificante y, por lo tanto, se establece que la temperatura tiende a cero.

El cálculo de la corriente I_{SD} que fluye entre la fuente S y el drenaje D debido a un voltaje infinitesimal, así bien como el voltaje de caída, se mide como $U_{P_2P_1} = (f_{P_1} - f_{P_2})/e$ entre los reservorios P_1 y P_2 , como se despliega en la figura 3.9. A través de estas cantidades, se estudia la resistencia de Hall generalizada de 4-puntas [25]

$$R_{xy}(B) := \frac{U_{P_2P_1}}{I_{SD}} = \frac{h}{2e^2} \frac{\sum_j (\mathcal{R}_{P_1j} - \mathcal{R}_{P_2j}) T_{jS}}{T_{DS} + \sum_{ij} T_{Di} \mathcal{R}_{ij} T_{jS}}, \quad (3.23)$$

como función del campo magnético perpendicular \mathbf{B} . En este último paso, se aplica la fórmula de terminales múltiples conectados al nanosistema (3.19), así como para la corriente que fluye entre la fuente S y el drenaje D (3.21). Por lo tanto, la resistencia de Hall se mide en múltiplos de $h/2e^2$.

La cuantización de la resistencia de Hall es extremadamente precisa. Como resultado, el efecto Hall cuántico es utilizado para la redefinición de ciertas unidades en el sistema internacional (SI)⁵. Obsérvese la figura 4.1 que muestra la resistencia de Hall (líneas punteadas de color gris) y el DOS (escala de colores) en función del campo magnético y de la energía.

⁵ Para obtener más información de este proyecto consultar: <https://physics.nist.gov/cgi-bin/cuu/Value?rk90>

Resultados Numéricos y Análisis

Este capítulo está dedicado a los resultados obtenidos para las simulaciones del transporte cuántico en nanocintas de Fosforeno. El tamaño de las nanocintas se presenta en múltiplos de $a = a_0 := 0.442$ nm y la energía de inyección de los electrones se encuentran medidas por encima de la brecha energética. Al inicio de este capítulo se estudian los niveles de Landau, dicho de otra manera, se estudia la resistividad de las nanocintas de Fosforeno en presencia de distintas magnitudes de un campo magnético externo perpendicular a la nanocinta. En particular, se muestran resultados muy interesantes para campos magnéticos fuertes; el análisis de los resultados se presentan en la siguiente sección. También se muestran figuras de la intensidad local de corriente, que se encuentra normalizada al valor más alto correspondiente para cada simulación; de esta misma forma se ha normalizado la densidad local de estados. Se observa la formación de estados de borde en el interior de las nanocintas de Fosforeno de acuerdo al Hamiltoniano del sistema a lo largo de las dos direcciones cristalinas (4.4). Se estudia el comportamiento de la intensidad de corriente local y la LDOS. La corriente que se muestra en todas las figuras está en el régimen de un sistema estacionario, es decir, el flujo de corriente ya no cambia con el tiempo; de igual manera que con la LDOS. Los resultados muestran el carácter altamente anisotrópico del Fosforeno. Se observan patrones tanto simétricos como asimétricos para la inyección de electrones desde diferentes direcciones, probando la fuerte anisotropía del Fosforeno.

Las condiciones necesarias antes de definir el cálculo de la corriente por el método de NEGF son: tamaño del sistema, de los contactos fuente y drenaje, campo magnético, contactos utilizados y la energía de inyección. Tomando en cuenta el Hamiltoniano (3.3) se puede calcular la función de Green (3.14) y la función de Correlación (2.23) (que considera todos los contactos en el nanosistema), y con ello el flujo total de corriente, la LDOS, la DOS y por último la resistencia de Hall en las nanocintas de Fosforeno.

4.1. Magnetotransporte en nanocintas de Fosforeno

En esta sección, se va a estudiar el flujo local de corriente, la LDOS y los niveles de Landau en las nanocintas de Fosforeno. Este análisis se realizó mediante el método de NEGF aplicado al Hamiltoniano de amarre fuerte del Fosforeno, considerando la relación de dispersión a bajas energías y el Hamiltoniano efectivo bajo campos magnéticos. Se estudia las diferentes propiedades

y comportamientos que se presentan cuando se cambian los diferentes parámetros, como el campo magnético, la energía de inyección de la fuente S y, por último, el tamaño de la nanocinta así como de los contactos.

4.1.1. Niveles de Landau

En el cálculo de los niveles de Landau en el Fosforeno, se considera la relación de dispersión a bajas energías (3.10), por lo que el Hamiltoniano (3.8) se puede simplificar mediante

$$H_{eff} = \frac{p_x^2}{\mu_x} + \frac{p_y^2}{m_y}, \quad (4.1)$$

donde en unidades más simples se tiene que $m_x = 9.3\hbar/|t_1|a^2$ y $m_y = 3.67\hbar/|t_1|a^2$ son las masas anisotrópicas para las dos direcciones cristalinas y $\mu_x = 0.668\hbar/|t_1|a^2$ como la masa efectiva en la dirección x .

Considerando un campo magnético perpendicular al plano de la nanocinta como $\mathbf{B} = -B\mathbf{e}_z$, se puede escribir el potencial vectorial como

$$\mathbf{A} = By\mathbf{e}_x = -Bx\mathbf{e}_y. \quad (4.2)$$

Además, se debe de tener en cuenta que debido a la invariancia de norma es posible hacer la siguiente sustitución

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - e\mathbf{A}. \quad (4.3)$$

Por lo tanto, en la presencia de un campo magnético externo, el problema se puede simplificar a una sola banda energía, que se puede resolver exactamente en términos del problema estándar de los niveles de Landau. Así, el Hamiltoniano está dado por [54, cap. 9] [43]

$$H_{eff} = \frac{(P_x - eBy)^2}{2\mu_x} + \frac{P_y^2}{2m_y} \quad (4.4a)$$

$$H_{eff} = \frac{(P_y + eBx)^2}{2m_y} + \frac{P_x^2}{2\mu_x} \quad (4.4b)$$

De esta manera, el espectro de eigenenergías (el cálculo detallado para obtener las eigenenergías se realiza en la sección 4.1.4) del Hamiltoniano (4.4) queda como

$$E_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{\hbar e B}{\sqrt{\mu_x m_y}} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.5)$$

Partiendo del método de NEGF, se obtiene numéricamente el espectro de energía de los niveles de Landau. Se calculó la DOS para una energía y un campo magnético mediante la ecuación (2.5). El espectro muestra una serie equidistante de los niveles de Landau. Se aprecia además de que la relación entre la energía y el campo magnético es lineal.

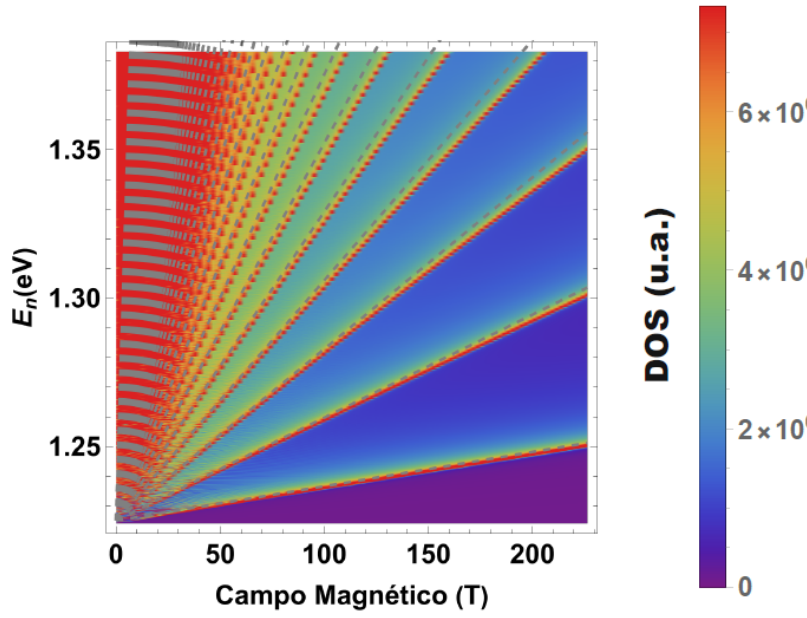


Fig. 4.1: Se muestra la DOS como función del campo y la energía. La DOS se calculó a partir del método de NEGF mediante la ecuación (2.5). Se observan los niveles de Landau; además se logra apreciar claramente el llamado abanico de Landau de los niveles de energía en expansión. Las líneas punteadas de color gris denotan el cálculo de la aproximación lineal del campo magnético de la expresión analítica (4.5).

En la figura 4.1 se observa el espectro de energías que se obtiene al calcular la DOS a partir del campo magnético y la energía. Se muestra que el cálculo numérico es una muy buena aproximación comparada con la expresión analítica (4.5), donde se han calculado los primeros 30 niveles de Landau en función del campo magnético. Dado el espectro de energías, además se puede hacer un análisis de la resistencia de Hall en función del campo magnético para una energía fija, en donde se espera poder observar este comportamiento cuántico de los niveles de Landau. A partir de dichos resultados, se cuenta con los elementos suficientes para realizar un análisis del flujo local de corriente y del LDOS en el interior de las nanocintas de Fosforeno; así de esta forma observar más a detalle su comportamiento dentro del régimen cuántico.

4.1.2. Efecto Hall cuántico

A continuación se presentan una serie de resultados para la resistencia de Hall R_{xy} como función del campo magnético \mathbf{B} . Se muestra que al encontrarnos en campos magnéticos débiles la resistencia de Hall R_{xy} se encuentra en un régimen clásico, donde la resistencia aumenta linealmente a la par con el campo magnético, mientras que cuando nos encontramos en campos magnéticos fuertes la resistencia comienza a presentar una serie de mesetas extendidas. Este comportamiento en la resistencia (la cuantización de dicha medida), se puede describir en términos

cuánticos. Este fenómeno se le conoce como **efecto Hall cuántico entero**; la cual puede ser descrita por la siguiente expresión

$$R_{xy} = \frac{h}{2e^2} \frac{1}{n}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.6)$$

Aunque el descubrimiento del efecto Hall cuántico se remonta a 1980 [55], sigue siendo un tema que da mucho de que hablar como lo demuestra, por ejemplo, el descubrimiento reciente del efecto Hall de espín cuántico [56] y el efecto Hall anómalo cuántico [57].

A pesar de que las nanocintas de Fosforeno presentan un alto carácter anisótropo para sus dos direcciones cristalinas de alta simetría, dicha propiedad no afecta el espectro de energía de los niveles de Landau. Por lo tanto, al calcular la resistencia de Hall por el método de NEGF, se obtiene los mismos resultados al colocar la fuente S a lo largo de un borde de tipo *Armchair* (borde superior o inferior) que colocarlo a lo largo de un borde de tipo *Zigzag* (borde izquierdo o derecho). En el caso del drenaje D , éste se encontrara siempre en el borde opuesto al que se encuentra la fuente S , es decir, si la fuente se encuentra en el borde izquierdo entonces el drenaje se ubicara en el borde derecho y viceversa.

En la figura 4.2 se muestra los cálculos para la resistencia de Hall en función del campo magnético. Los cálculos se realizaron para una nanocinta de Fosforeno de un tamaño aproximado de $(L_x, L_y) \approx 275 \times 275 a_0 \approx 120 \times 120 \text{ nm}$ y para una energía de inyección de los electrones de $E - \Delta = 0.15 \text{ eV}$. La línea de color rojo muestra los resultados para una configuración donde la fuente S como el drenaje D se encuentran centrados y conectados sobre los bordes de una estructura de tipo *Armchair* (bordes superior e inferior respectivamente), mientras que la línea de color azul muestra los resultados para una configuración donde la fuente S y el drenaje D se encuentran centrados y conectados sobre los bordes de una estructura de tipo *Zigzag* (bordes izquierdo y derecho respectivamente). El ancho de los contactos utilizados (fuente S y drenaje D) tienen un tamaño aproximado de $L_S \approx L_D \approx 130 a_0 \approx 55 \text{ nm}$. En la figura 4.2 se observa como la resistencia de Hall aumenta conforme el campo magnético lo hace y presenta una serie de mesetas extendidas. Estas mismas se hacen presentes en los valores de la expresión (4.6), es decir, las mesetas se encuentran para valores de $R_{xy} = 1/n$ con $n = 1, 2, 3, \dots$. En esta figura, estos valores están representados por líneas horizontales punteadas de color gris, donde se puede apreciar como las mesetas corresponden con los valores de la expresión analítica. Se puede observar que el valor del campo magnético para llegar a la resistencia de Hall máximo ($R_{xy} = 1h/2e^2$)¹; es considerablemente alto (aproximadamente 500 T). Estos campos magnéticos llegan a valores muy grandes que experimentalmente no es posible acceder a ellos. El valor tan alto que se requiere se puede explicar mediante la expresión (4.5), dado que como ya se mencionó, la relación entre la energía y el campo magnético es de manera lineal. Debido a que se usa una energía relativamente grande, el valor del campo magnético para llegar al valor más alto también es muy alto. Por lo tanto, al hacer el cálculo de la resistencia de Hall usando energías más bajas el campo magnético necesario para llegar al valor más alto es mucho menor.

¹ Se define el valor de la resistencia como $\bar{R}_{xy} = R_{xy} * (2e^2/h)$. Debido a que se trata de una etiqueta se usa nuevamente R_{xy} para mayor simplicidad.

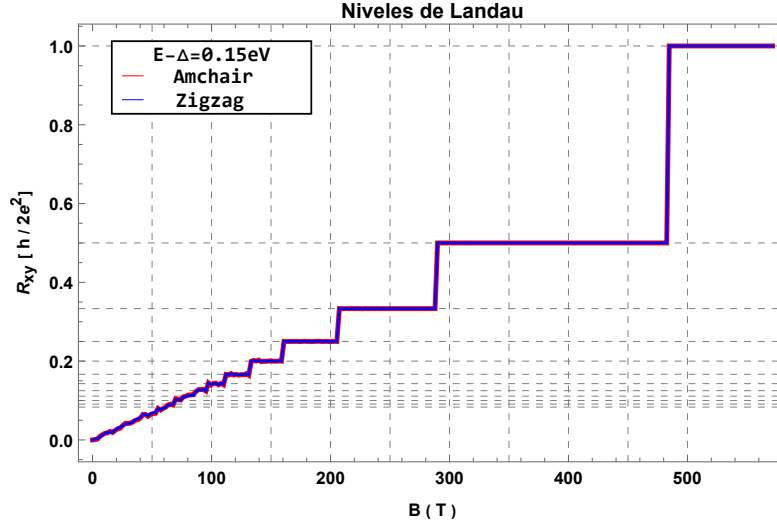


Fig. 4.2: Se muestra la resistencia de Hall en función del campo magnético calculada mediante el método de NEGF. Para campos magnéticos fuertes se observa como la resistencia de Hall comienza a presentar una serie de mesetas extendidas (alrededor de 7 mesetas bien definidas) conforme aumenta el campo magnético. La energía de inyección de los electrones en el sistema es de $E - \Delta = 0.15$ eV.

En la figura 4.3 se muestra los cálculos de la resistencia de Hall en función del campo magnético para una energía $E - \Delta = 0.048$ eV, siendo el tamaño de los contactos (fuente S y drenaje D) de $L_S \approx L_D \approx 262 a_0 \approx 115$ nm. Para este cálculo se aprecia que el tamaño de los contactos es considerablemente más grande en comparación con el caso anterior, esto debido a el efecto de la energía de los electrones, si bien al disminuir la energía de los electrones por ende la longitud de Fermi de estos electrones aumenta, generando oscilaciones importantes en los niveles de Landau, impidiendo observar con claridad la formación de las mesetas en el régimen cuántico. Se conservan los demás parámetros del cálculo anterior. Además de realizar los cálculos de la resistencia de Hall por el método de NEGF, es posible obtener estos mismos resultados a partir de la expresión analítica (4.5), obteniendo de esta manera la ecuación (4.7) que permite calcular el número de ocupación de los niveles de Landau, que sigue la expresión

$$n = \left\lceil \frac{E \sqrt{\mu_x m_y}}{\hbar e B} - \frac{1}{2} \right\rceil. \quad (4.7)$$

En la figura 4.3 se observa como el campo magnético necesario para llevar a la resistencia de Hall al valor más alto es considerablemente más bajo, debido a la energía que se utilizó en el cálculo. Se muestran además los resultados obtenidos por el método de NEGF comparados con la expresión analítica (4.7).

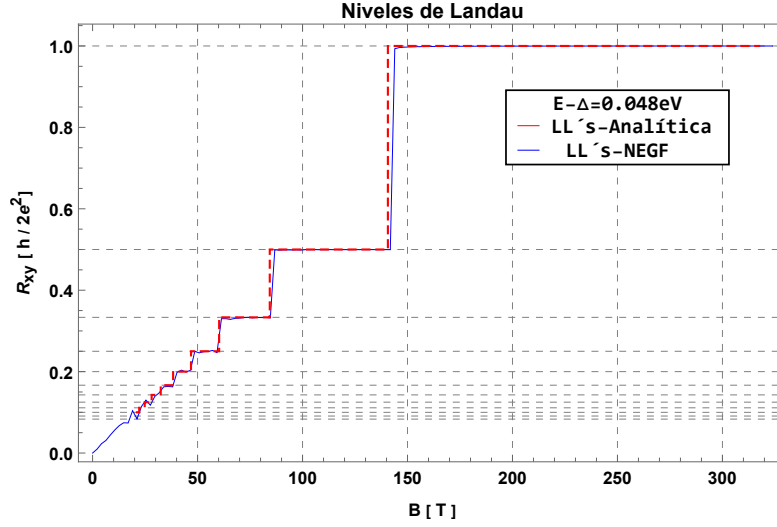


Fig. 4.3: Se muestra la resistencia de Hall para una energía de inyección menor ($E - \Delta = 0.048$ eV) en comparación con la figura 4.2. Además se muestra con líneas punteadas de color rojo los resultados de la expresión analítica (4.7). Los cálculos mediante el método de NEGF resultan ser una buena aproximación a los resultados analíticos.

4.1.3. Estados de borde

Una motivación más para el estudio del efecto Hall cuántico se ve estimulada por el hecho de que al encontrarnos en el régimen cuántico, el análisis del flujo local de corriente así como de la LDOS muestran que la corriente se conduce por estados de borde a lo largo del límite del sistema, mientras que la mayor parte es aislante.

En la figura 4.4 se muestra la conducción por los estados de borde. En 4.4 a) para una resistencia de $R_{xy} = 1/3$ se espera observar tres estados de borde en el flujo local de corriente así como también para la LDOS 4.4 b) respectivamente, dentro de las nanocintas de Fosforeno, dichos estados de borde se observan claramente en las figuras. En el sistema se colocaron la fuente y el drenaje en los bordes de estructura de tipo *Armchair* con un tamaño aproximado de los contactos de $L_S \approx L_D \approx 157 a_0 \approx 69$ nm. Se observa la formación de estados de borde debido al campo magnético externo, lo que lleva al efecto Hall al régimen cuántico. Se muestra con líneas de color verde la ubicación y el tamaño del contacto fuente mientras que para el drenaje se usan líneas de color rosa.

En la figura 4.5 se muestran los resultados obtenidos para la resistencia de Hall $R_{xy} = 1/2$. En la columna izquierda se realizaron los cálculos para contactos de tamaño aproximado de $L_S \approx L_D \approx 234 a_0 \approx 103$ nm. Se puede apreciar que al tener los contactos con un mayor tamaño, tanto en el flujo local de corriente como en la LDOS los electrones inyectados por la fuente no logran terminar su trayectoria, debido a que gran parte de ellos son recolectados por el drenaje, con la oportunidad de que solo algunos de ellos escapen. Caso contrario a la columna derecha, donde el tamaño aproximado ahora de los contactos es de $L_S \approx L_D \approx 138 a_0 \approx 61$ nm, gran parte de los electrones inyectados logra terminar su trayectoria por los estados de borde, pues al reducir el tamaño del drenaje los electrones tienen mayor oportunidad de escapar para continuar con su recorrido. Ambas columnas presentan el flujo local de corriente en la parte superior así como también de la LDOS en la parte inferior.

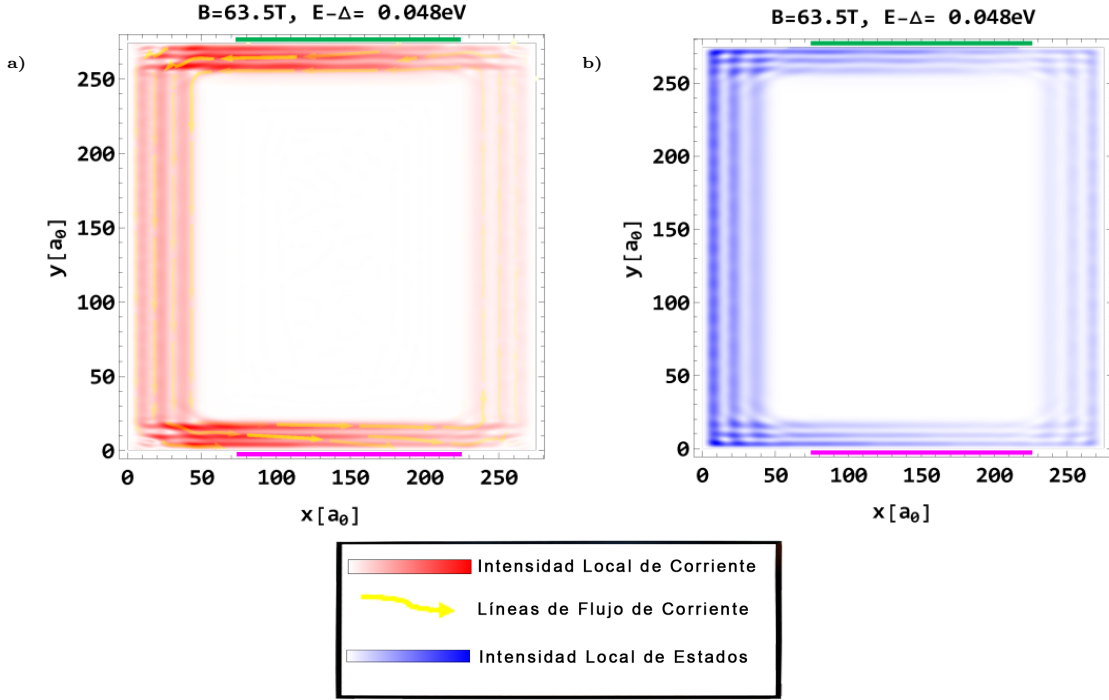


Fig. 4.4: Se muestra el efecto Hall cuántico para un campo magnético de $B = 63.5\text{ T}$ correspondiente a la resistencia de Hall $R_{xy} = 1/3$. Los contactos utilizados se ubican sobre los bordes *Armchair*. En la figura **a)** se muestra el flujo local de corriente. Se aprecia como la conducción de esta misma se encuentra a lo largo del borde del sistema. Para la figura **b)** se observa la misma formación de estados de borde, con la diferencia de que ahora se trata de la LDOS (2.4). En la parte inferior se muestra una pequeña Tabla, que indica la escala de la intensidad local de corriente así como también de la intensidad local de estados, en flechas de color amarillo las líneas del flujo de corriente local. Por último con líneas de color verde se muestra la posición de la fuente y con líneas de color rosa el drenaje.

Si bien, se observa en la figuras 4.4 y 4.5 la formación de los estados de borde tanto para el flujo local como para la LDOS. Los resultados demuestran congruencia con los niveles de Landau obtenidos de la figura 4.3. Los estados de borde que se observan son afectados por el alto carácter anisotrópico del Fosforeno, que se explica con todo detalle en la sección 4.1.4.

4.1.4. Ancho de los estados de borde

En la figura 4.5 se observa claramente que al encontrarse en el régimen cuántico, la corriente se conduce por estados de borde. Dada la interacción del campo magnético externo, éste causa que los electrones sigan la trayectoria de un ciclotrón sobre los bordes del sistema de la nanocinta. Éstos mismos se ven afectados por el alto carácter anisótropo que posee el Fosforeno. A lo largo de las dos direcciones cristalinas de alta simetría, se observa como se hace presente la alta anisotropía del Fosforeno. Se observa que a lo largo de los bordes tipo *Zigzag* la distribución espacial de los estados de borde es mayor comparada con la distribución en la dirección *Armchair*, es decir, la distribución espacial alrededor de la nanocinta no es igual en una dirección que en la otra. Esto debido a la relación que existe con la longitud magnética, como

4. RESULTADOS NUMÉRICOS Y ANÁLISIS

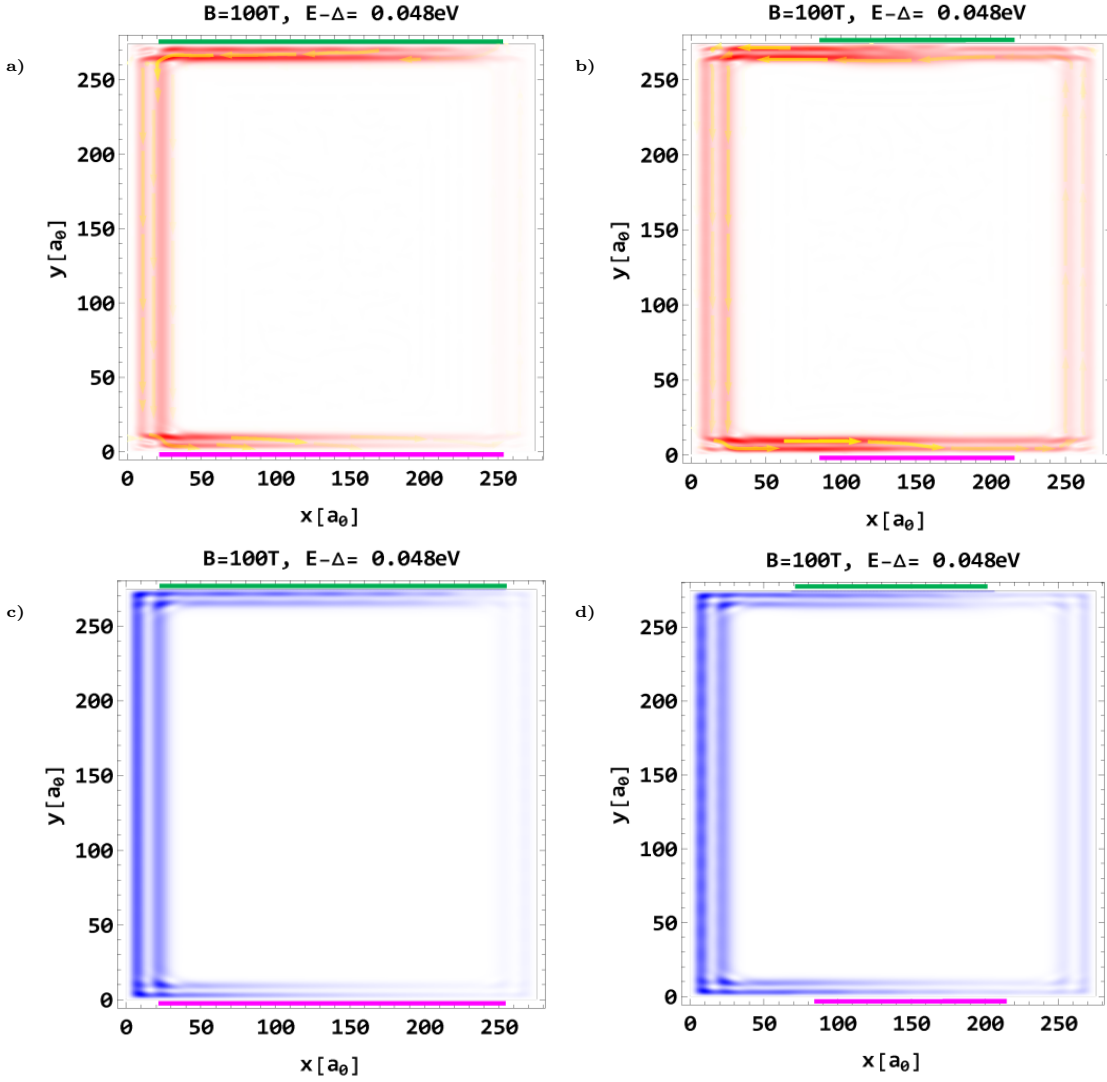


Fig. 4.5: Formación de estados de borde, se muestra el campo magnético correspondiente a $R_{xy} = 1/2$. Los contactos se encuentran sobre bordes tipo *Armchair*. En la columna izquierda el tamaño aproximado de la fuente y el drenaje corresponde a $\approx 234 a_0$, mientras que para la columna derecha es de $\approx 138 a_0$. La corriente se conduce por los estados de borde, dejando al resto de la nanocinta como aislante. En las figuras a) y b) se muestra el flujo local de corriente; para contactos (fuente y drenaje) de distinto tamaño. Para los contactos de mayor tamaño se observa que los electrones son recolectados por el drenaje, mientras que para contactos de menor tamaño una gran parte de los electrones logran escapar del drenaje continuando su trayectoria. En las figuras c) y d) se presenta la misma situación para la LDOS.

$$l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}. \quad (4.8)$$

El hecho de que la fuerte anisotropía que posee el Fosforeno afecte a los estados de borde se puede explicar mediante las masas efectivas; para las dos direcciones cristalinas. Esto sin importar la ubicación de la fuente de inyección ni del drenaje, ya que el origen del fenómeno radica en las masas anisotrópicas y no en la posición de los contactos. Este hecho es comprobado en la figura 4.6, donde se muestra nuevamente la formación de los estados de borde bajo los mismos parámetros de la figura 4.5; es decir, se selecciona el mismo campo magnético correspondiente a

$R_{xy} = 1/2$. El tamaño aproximado de los contactos utilizados (fuente y drenaje) en la columna izquierda es de $\approx 234 a_0$ mientras que para la columna derecha es de $\approx 138 a_0$, con la diferencia de que ahora éstos se encuentran sobre los bordes de una estructura *Zigzag*. De esta manera, se muestra que a pesar de haber cambiado la ubicación de los contactos la distribución espacial de los estados de borde, se mantiene de la misma forma en que se presentó en la figura 4.5, es decir, la distribución espacial sigue siendo mayor a lo largo de la dirección y que en la dirección x . Debido a que, como ya se mencionó este fenómeno es una consecuencia directa de la fuerte anisotropía, en particular de las masas anisotrópicas y no a la posición de la fuente de inyección y/o drenaje del sistema.

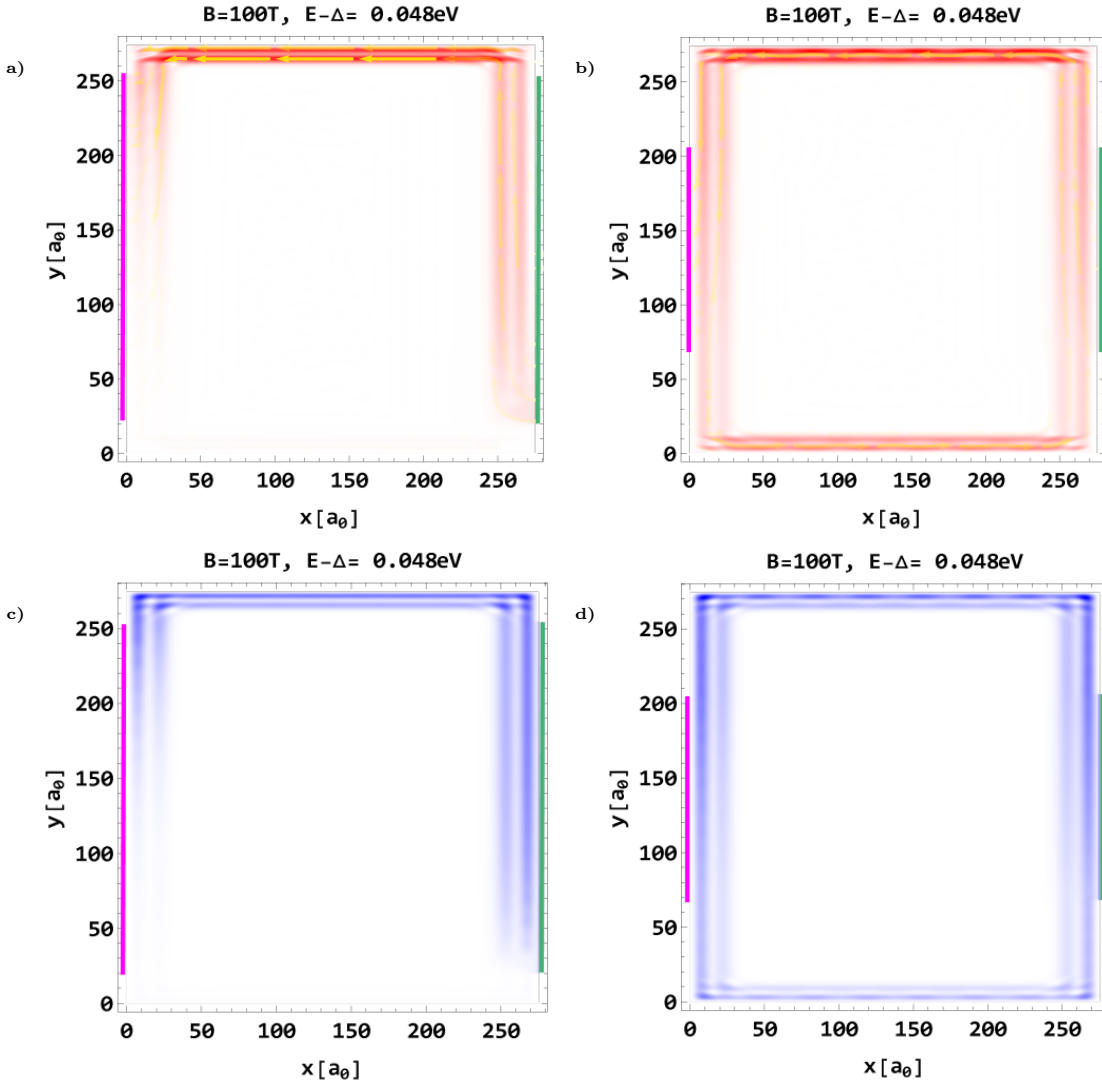


Fig. 4.6: Formación de los estados de borde. Los contactos se encuentran sobre los bordes de una estructura zigzag. La fuente y el drenaje se representan por medio de líneas de color verde para ser más concisos. Campo magnético correspondiente a $R_{xy} = 1/2$. Al observar a detalle se aprecia nuevamente que la distribución espacial de los estados de borde es mayor en la dirección y que en la dirección x . Sin importar la ubicación tanto de la fuente como del drenaje, debido a que la causa de esta distribución espacial en los estados de borde se explica por medio de las masas anisotrópicas del Fosforeno. En las figuras **a)** y **c)** el tamaño de la fuente y el drenaje es mayor comparado con el de las figuras **b)** y **d)**, ocasionando que en las figuras donde el tamaño de los contactos es mayor una gran parte de los electrones son recolectados por el drenaje, caso contrario donde el tamaño es menor.

Un hecho importante que se presenta en la figura 4.6, es que al fijarnos en las figuras con contactos más grandes (4.6 a) y 4.6 c)) la mayor parte de los electrones son recolectados, mientras que con los contactos más pequeños (figuras 4.6 b) y 4.6 d)); la cantidad de electrones que son recolectados es mucho menor, lo que deja ver con mayor claridad la formación de los estados de borde alrededor de todos los bordes del sistema. Este mismo hecho se presenta de manera análoga en la figura 4.5. A lo largo de las direcciones cristalinas de alta simetría en los estados de borde, como ya se mencionó anteriormente, se explica mediante la diferencia de las masas anisotrópicas.

A partir del Hamiltoniano efectivo (4.4). Es posible demostrar la diferencia espacial en los estados de borde a lo largo de las dos direcciones cristalinas antes vista.

4.1.4.1. Estados de borde a lo largo de la dirección x (Armchair)

Al tomar el Hamiltoniano continuo del Fosforeno, y teniendo en cuenta el campo magnético externo, este se expresa mediante

$$H_{eff} = \frac{(P_x - eBy)^2}{2\mu_x} + \frac{P_y^2}{2m_y} \quad (4.9)$$

entonces, utilizando el ansatz de ondas planas a lo largo de la dirección x

$$\psi_k(r) = e^{ikx}\chi(y), \quad (4.10)$$

se obtiene entonces que la ecuación de Schrödinger es

$$E\chi(y) = \left[\frac{(\hbar k - eBy)^2}{2\mu_x} + \frac{P_y^2}{2m_y} \right] \chi(y). \quad (4.11)$$

Al reescribir la ecuación Schrödinger (4.11), se observa que es equivalente a la del oscilador armónico más una fase, obteniendo así

$$E\chi(y) = \left[\frac{P_y^2}{2m_y} + \frac{1}{2}m_y\omega_c^2(y - y_k)^2 \right] \chi(y), \quad (4.12)$$

con $\omega_c = \frac{eB}{\sqrt{\mu_x m_y}}$, $y_k = \frac{\hbar k}{eB}$ y $y_0 = \sqrt{\frac{\hbar\sqrt{\mu_x}}{eB\sqrt{\omega_c}}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m_y\omega_c}}$. Se debe tener en cuenta que el momento \mathbf{k} de las ondas planas determina el vértice y_k de la solución parabólica. El espectro de las eigenenergías se obtiene al resolver la ecuación de Schrödinger (4.12) del oscilador armónico más una fase obteniendo así

$$E_r = \hbar\omega_c \left(r + \frac{1}{2} \right); \quad r \geq 0 \quad (4.13)$$

y las eigenfunciones

$$\psi_{r,k}^{ac}(\vec{r}) = c_r e^{ikx} \mathcal{D}_r \left(\frac{y - y_k}{y_0} \right), \quad (4.14)$$

donde

$$\mathcal{D}_r(y) \equiv \frac{D_r(\sqrt{2}y)}{\sqrt{r!}} \quad (4.15)$$

son las funciones cilíndricas parabólicas reproporcionadas [58, cáp. 19] al enfoque de la ecuación (4.14) y c_r es una constante de normalización. El índice r tiene que ser un entero $r = 0, 1, 2, \dots$, por que las eigenfunciones tienen que ser normalizables; por lo tanto, las funciones cilíndricas parabólicas se pueden simplificar mediante $\mathcal{D}_n(y) = e^{-y^2/2} H_n(y) / \sqrt{2^n n!}$, donde $H_n(y)$ son los polinomios de Hermite.

4.1.4.2. Estados de borde a lo largo de la dirección y (Zigzag).

De manera análoga al caso anterior, se puede resolver el Hamiltoniano continuo del Fosforeno ahora a lo largo de la dirección y . Por lo tanto, se tiene que la solución equivalente queda como

$$E\chi(x) = \left[\frac{P_x^2}{2\mu_x} + \frac{1}{2} \mu_x \omega_c^2 (x - x_k)^2 \right] \chi(x) \quad (4.16)$$

con $x_k = \frac{\hbar k}{eB} = y_k$ y $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu_x \omega_c}}$. Por lo que las energías propias son

$$E_r = \hbar \omega_c \left(r + \frac{1}{2} \right); \quad r \geq 0 \quad (4.17)$$

y las funciones propias se escriben como

$$\psi_{r,k}^{zz}(\vec{r}) = c_r e^{iky} \mathcal{D}_r \left(\frac{x - x_k}{x_0} \right) \quad (4.18)$$

Nuevamente se presenta la misma solución² de la ecuación (4.12) y c_r la constante de normalización.

Se observa en las ecuaciones (4.14) y (4.18); que las funciones propias en ambas direcciones cristalinas son exactamente iguales con la excepción de los términos x_0 e y_0 . La diferencia entre

² En (4.12) y (4.16) la solución es la misma con un enfoque en diferentes direcciones.

estos términos es sencillamente las diferentes masas. A consecuencia de este hecho, se origina una diferencia importante entre una dirección y otra.

Al considerar la relación de dispersión a bajas energías, se debe de tomar en cuenta las masas efectivas y anisotrópicas para las dos direcciones. Por lo tanto se tiene que $x_0 \neq y_0$, cuya diferencia entre éstos términos explica la distribución espacial de los estados de borde alrededor de las diferentes direcciones cristalinas.

Se observa en la dirección x que en los estados de borde que se forman, el espacio entre ellos es muy estrecho, provocando de esta manera que la distribución espacial de todos éstos sea dentro de un espacio muy corto; mientras que el espacio entre los estados de borde a lo largo de la dirección y se encuentran ligeramente con una mayor separación. Por este motivo, se puede apreciar en las figuras 4.4, 4.5 y 4.6 una mayor distribución espacial a lo largo de la dirección y mientras que en la dirección x los estados de borde se encuentran en una distribución espacial muy limitada, causando incluso en ocasiones que dichos estados de borde se encuentren encima unos de otros.

4.2. Anisotropía, flujo local de corriente y LDOS

La peculiar estructura electrónica que posee el Fosforeno muestra una intrínseca brecha de banda y un alto carácter anisotrópico, lo que hace que los electrones se comporten de manera diferente dependiendo la dirección que tomen. Se puede encontrar que el Fosforeno tiene una mayor movilidad de portadores de carga [10, 22] que otros materiales bidimensionales [16]. Debido a la intrínseca brecha de energía del Fosforeno lo convierte en un gran candidato para los semiconductores. Como consecuencia, el papel que desempeña el transporte electrónico es de suma importancia, ya que es la clave para el control y manipulación de los electrones.

Por lo tanto, en esta sección se va a estudiar teóricamente el flujo local de corriente y la LDOS. En particular, se enfoca en resultados como la fuerte anisotropía que afecta a la corriente local desde diferentes direcciones y configuraciones.

Para mostrar como la anisotropía afecta el flujo local de corriente y el LDOS, se trabaja con tres distintas configuraciones desde diferentes direcciones. En las tres configuraciones se tiene que el tamaño de los contactos (fuente y drenaje) se varía para observar como cambia el flujo local de corriente así como el LDOS, de la misma manera que con distintas energías. Para la primera configuración, se trabaja con los contactos en los bordes de una estructura *Armchair*, en la segunda configuración en bordes *Zigzag*, mientras que para la última configuración se tiene una combinación entre las estructuras anteriores colocando los contactos en las esquinas del sistema.

4.2.1. Sin efectos de borde

Para esta primera parte de la investigación se ha colocado un potencial complejo en todos los bordes de la nanocinta (exceptuando los bordes en donde se ubican la fuente de inyección y el drenaje) con el fin de suprimir los efectos de borde, como se expone en [59].

4.2.1.1. Contactos en bordes *Armchair*

Para esta primera configuración se ha colocado la fuente y el drenaje en los bordes del sistema tipo *Armchair*. La fuente se encuentra centrada en la parte superior de la nanocinta mientras que el drenaje en su contrario equivalente. Se va a caracterizar el transporte electrónico en el sistema. Las dimensiones del sistema se han categorizado en tres distintos tamaños en los contactos (fuente y drenaje) para investigar la dependencia del tamaño en el flujo local de corriente así como en la LDOS.

En la figura 4.7 se muestra el flujo local de corriente como también la LDOS. La simulación se realizó para un sistema de tamaño aproximado de $L_x = L_y \approx 275 a_0 \approx 122 \text{ nm}$, siendo el tamaño de los contactos (de izquierda a derecha) de $110 a_0 \approx 49 \text{ nm}$, $138 a_0 \approx 60 \text{ nm}$ y $165 a_0 \approx 73 \text{ nm}$, para una energía de $E - \Delta = 0.13 \text{ eV}$.

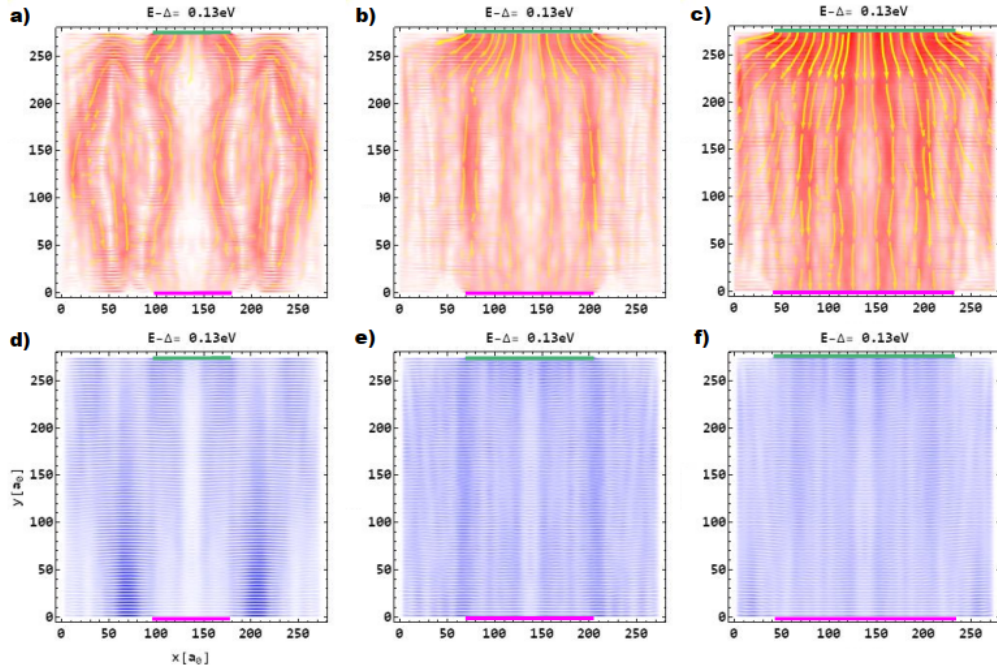


Fig. 4.7: Se observa el flujo local de corriente (figuras superiores) y la LDOS (figuras inferiores) para una energía fija. Los contactos (fuente y drenaje) aumentan en tamaño de izquierda a derecha. Además de suprimir los efectos de borde. En la figuras **a)**-**c)** se muestra el flujo local de corriente. En las figuras **d)**-**f)** se presenta la LDOS de las figuras **a)**-**c)**. Se aprecia que al ser menor el tamaño de la fuente da lugar al fenómeno de difracción debido a la naturaleza ondulatoria de los electrones.

Se observan en estas figuras como el haz de electrones, al ser inyectado en un contacto de menor tamaño (figuras 4.7 **a)** y 4.7 **d)**), los electrones muestran su naturaleza ondulatoria. Se hace presente el fenómeno de difracción a lo largo de la nanocinta. Al aumentar el tamaño de la fuente, dicho fenómeno disminuye considerablemente como es de esperarse. Por lo que el tamaño de los contactos afecta el flujo local de la corriente.

Al inyectar el haz de electrones sobre los bordes *Armchair* se observa en la LDOS, que la intensidad máxima y mínima se encuentran mezcladas a lo largo de toda la nanocinta. Mientras tanto, para el flujo local de corriente se aprecia una dispersión del haz de electrones inyectado, el cual se dispersa por varias direcciones a lo largo de toda la nanocinta, debido a la estructura de

4. RESULTADOS NUMÉRICOS Y ANÁLISIS

banda que posee el Fosforeno. Para más detalle de la dispersión del haz de electrones véase el apéndice A.

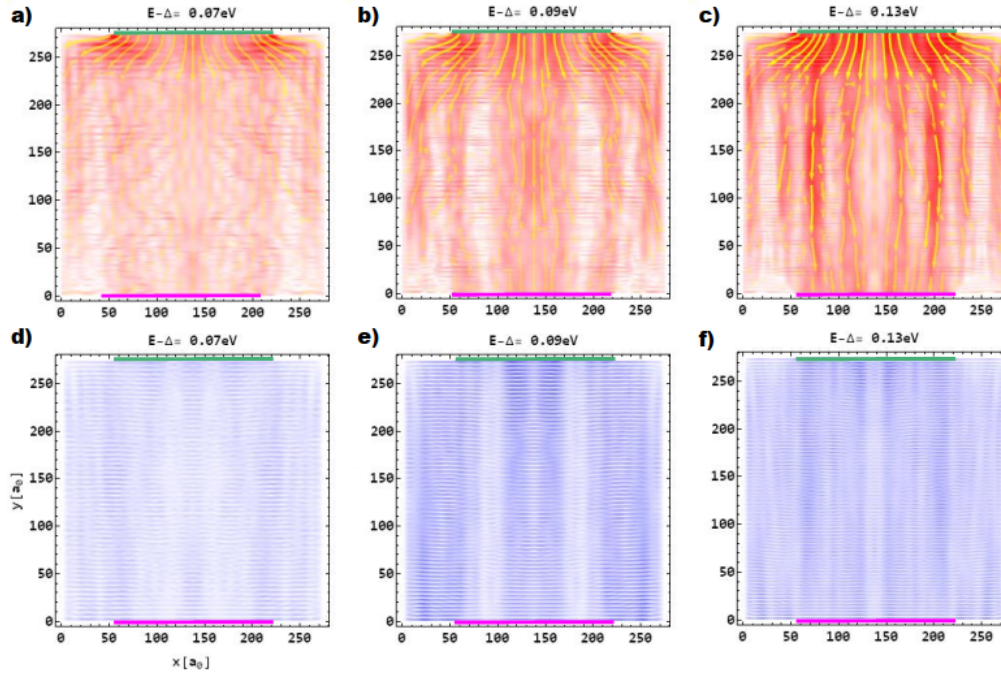


Fig. 4.8: Flujo local de corriente (figuras superiores) y la LDOS (figuras inferiores). A diferencia de la figura 4.7 ahora el tamaño de los contactos se mantiene fijo, mientras que la energía aumenta de izquierda a derecha. Se suprimen los efectos de borde. El tamaño aproximado de los contactos es de ≈ 78 nm.

Ahora bien, en la figura 4.8 se fija el tamaño de los contactos (tamaño considerable para no observar la dispersión de los electrones) dado que ahora se hace una variación en la energía; de $E - \Delta = 0.07$ eV, 0.09 eV y 0.13 eV de izquierda a derecha. En esta figura se observa que las líneas de flujo local no siguen un camino fijo, sino que al igual que en la figura anterior se dispersan por todo el ancho de la nanocinta. Al aumentar la energía esta dispersión se hace mucho más clara. La LDOS correspondiente refleja nuevamente que los modos de transporte de energía se mezclan con los de bajas energías a lo largo de la nanocinta.

4.2.1.2. Contactos en bordes *Zigzag*

En esta configuración se coloca la fuente y el drenaje en los bordes del sistema sobre una estructura de tipo *Zigzag*. La fuente se encuentra centrada en la parte izquierda de la nanocinta mientras que el drenaje en su contrario equivalente.

Se hace la simulación en el caso análogo de la figura 4.7, bajo los mismo parámetros. En la figura 4.9 se observan las mismas características que para el caso *Armchair*, el fenómeno de difracción debido a las propiedades ondulatorias de los electrones. Al aumentar el tamaño de la fuente de inyección la dispersión de los electrones es mucho menor.

Sin embargo, en esta ocasión al inyectar el haz de electrones sobre los bordes *Zigzag*, se observa en la LDOS, que las intensidades más altas tienen un mayor dominio sobre las de menor

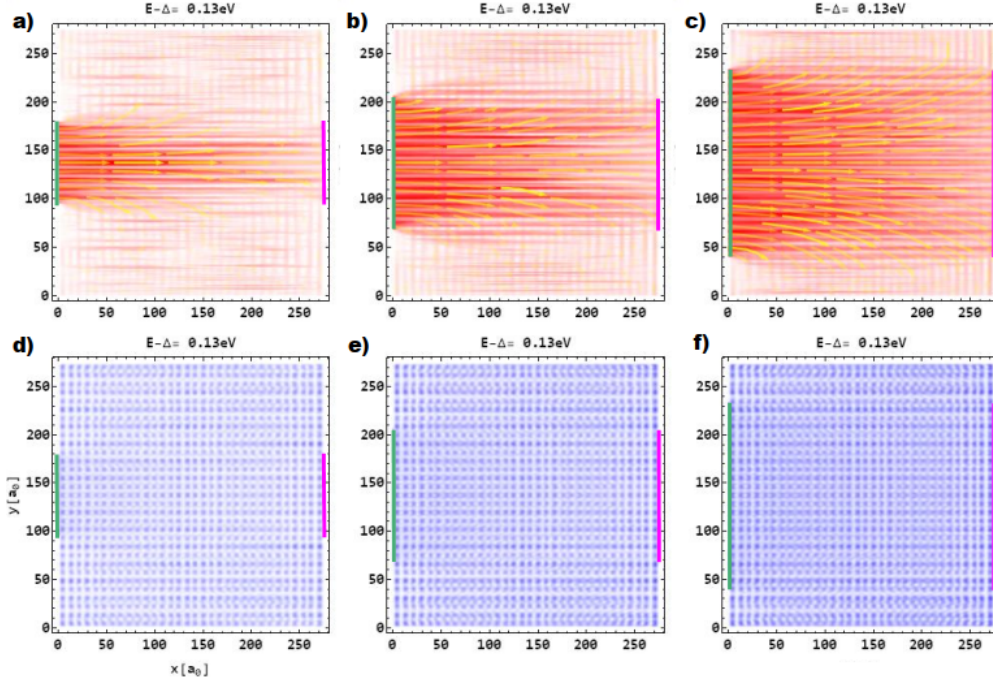


Fig. 4.9: Se muestra el flujo local de corriente y la LDOS, equivalente a la figura 4.7, con la fuente de inyección sobre los bordes *Zigzag*, al igual que el drenaje. Se observa que mientras el flujo local de corriente se aleja del centro se empieza a notar una dispersión en los extremos del haz de electrones.

intensidad, aunque estos al igual que en el figura 4.8, se mezclan entre sí por toda la nanocinta. Además, de que en el flujo local de corriente muestra una dispersión mucho más grande a lo largo de la dirección x ; cuando la fuente de inyección se encuentra en el borde *Zigzag* en comparación cuando se encuentra en el borde *Armchair*, esto se ve reflejado en la LDOS de las figuras 4.9 y 4.10. Estos resultados van de acuerdo con lo que se expone en [2].

En la figura 4.10 se tiene el caso análogo de la figura 4.8 pero ahora con los contactos en los bordes *Zigzag*. En estas figuras se observan que las líneas de flujo local siguen un camino más homogéneo, cuando la fuente de inyección se encuentra sobre los bordes *Zigzag*, comparado cuando la fuente de inyección se encuentra en los bordes *Armchair*. Al aumentar la energía se hace mucho más notable que el haz de electrones sufre una dispersión en los bordes, véase el apéndice A. La LDOS correspondiente, refleja que la intensidad máxima se mezcla con las intensidades más bajas, a lo largo de la nanocinta, tanto en fuentes de inyección *Armchair* como *Zigzag*.

4.2.1.3. Contactos en ambos bordes

En la última configuración, se coloca la fuente y el drenaje en la esquina superior izquierda y en en la esquina inferior derecha, respectivamente. Tanto la fuente y el drenaje se encuentran en bordes de tipo *Armchair* como *Zigzag*.

En este caso la simulación se realiza solo para diferentes energías, el equivalente a las figuras 4.8 y 4.10, dado que las figuras 4.7 y 4.9 se ha mostrado el efecto de considerar una fuente de inyección de tamaño bastante menor. Se muestra en la figura 4.11 que las líneas de flujo de

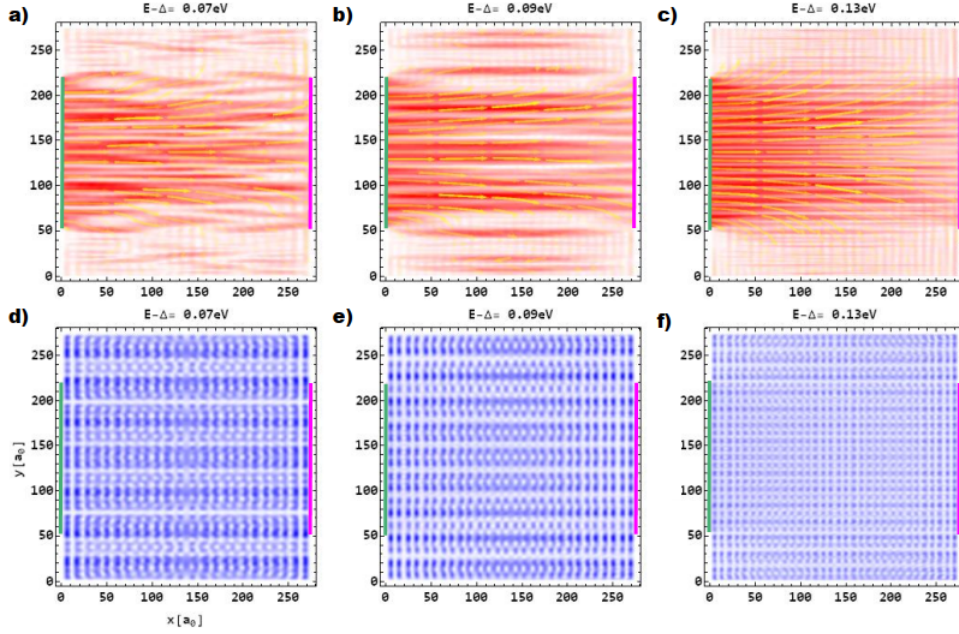


Fig. 4.10: Flujo local de corriente (figuras superiores) y la LDOS (figuras inferiores). Los contactos (fuente y drenaje) se encuentran ubicados sobre los bordes tipo *Zigzag* y mantiene un tamaño aproximado fijo de 78 nm; mientras que el valor de la energía aumenta de izquierda a derecha. Análogo a la figura 4.8.

corriente tienden por tomar el camino de menor dispersión, es decir, en la dirección *Armchair* o dicho de otra forma hacia el eje x . Este fenómeno se puede explicar por medio de la estructura de banda del Fosforeno, véase el apéndice A.

4.2.2. Efectos de borde

En la segunda parte de la investigación se ha omitido el potencial complejo que se había colocado en la sección 4.2.1. De esta manera, se muestra como los efectos de borde afectan el flujo local de corriente y la LDOS.

En la figura 4.12 se muestra el caso para dos energías que se utilizaron anteriormente ($E - \Delta = 0.07 \text{ eV}$ y 0.09 eV); esto para comparar estas figuras, ahora con los efectos de borde. Se conserva el mismo tamaño de los contactos que se ha trabajado para las tres diferentes configuraciones anteriores. Sin embargo, en esta ocasión se ha omitido el potencial complejo que se había colocado anteriormente para suprimir los efectos de borde.

En las figuras 4.12 a) y 4.12 d) corresponden al equivalente a las figuras 4.8 b) y 4.8 e), donde la fuente y el drenaje se sitúan sobre los bordes de una estructura de tipo *Armchair*. Ahora se observa la formación de patrones muy interesantes para el flujo local de corriente. Se muestra un patrón simétrico a la mitad de la nanocinta paralelo al eje y , debido a el flujo local de corriente esta dirigido en esta dirección (de arriba hacia abajo y viceversa); esto por las posición de la fuente y el drenaje. Mientras que para el LDOS se aprecia como la dispersión espacial aumenta considerablemente a lo largo de toda la nanocinta. Ahora bien, el caso de las figuras 4.12 b) y 4.12 e) correspondientes a las figuras 4.11 a) y 4.11 d). Se observa nuevamente la formación de

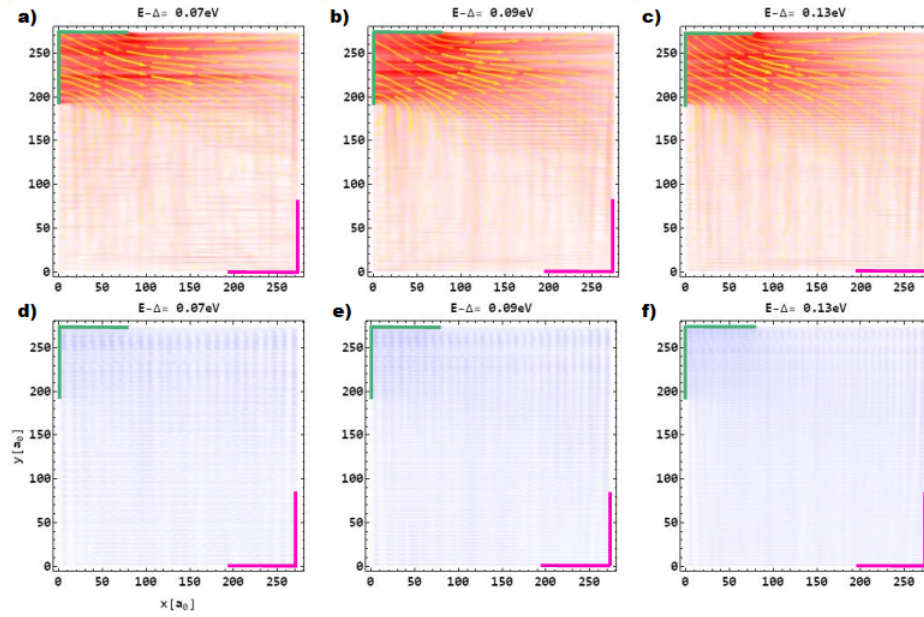


Fig. 4.11: Flujo local de corriente (figuras superiores) y la LDOS (figuras inferiores); los contactos (fuente y drenaje) se encuentran en la esquina superior izquierda y la esquina inferior derecha, respectivamente. El tamaño de los contactos se mantiene fijo. Se muestra que la máxima intensidad local de corriente se sitúa al margen donde se encuentra la fuente de inyección (esquina superior izquierda). La mayor parte de las líneas de corriente siguen el camino de menor dispersión. Sin embargo algunas líneas de corriente se desvían hacia la parte inferior de la nanocinta.

un patrón en el flujo local de corriente: en esta ocasión, como es de esperar, el patrón que se forma es simétrico a la mitad de la nanocinta paralelo al eje x , nuevamente esto es debido a la posición de los contactos.

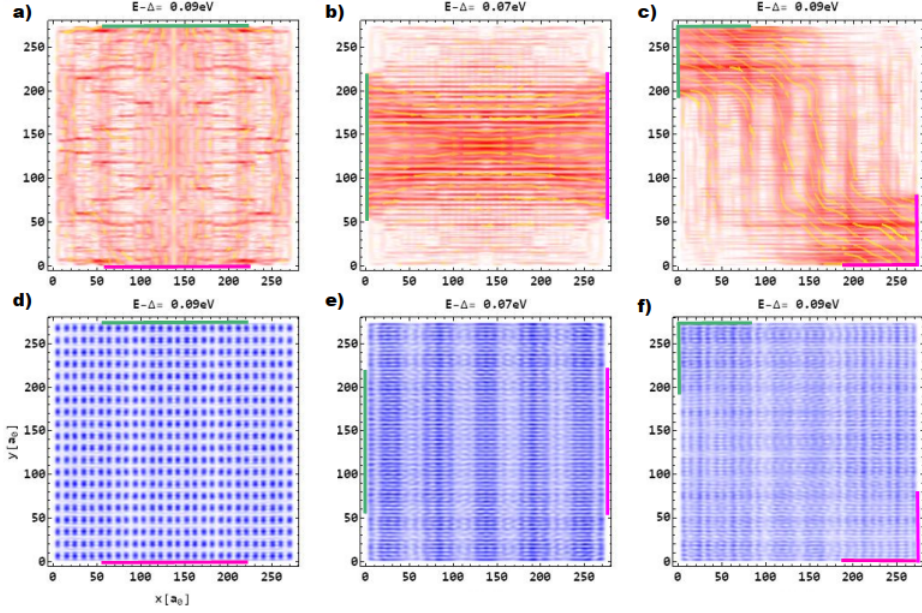


Fig. 4.12: El flujo local de corriente forma patrones muy peculiares (figuras superiores) y la LDOS muestra una dispersión por toda la nanocinta acompañado de intensidades muy altas, esto para cada una de las configuraciones de los contactos que se utilizó. Replicando la simulación para algunas figuras anteriores: 4.12 a) y 4.12 d) \rightarrow 4.8 b) y 4.8 e), 4.12 b) y 4.12 e) \rightarrow 4.11 a) y 4.11 d), por último 4.12 c) y 4.12 f) \rightarrow 4.11 b) y 4.11 e). La simulación se realizó bajo los mismo parámetros, ahora sin suprimir los efectos de borde.

En la última configuración, las figuras 4.12 c) y 4.12 f) corresponden a las figuras 4.11 b) y 4.11 e), con $E - \Delta = 0.09$ eV. En el flujo local de corriente se vuelve a observar la formación de un patrón. En esta configuración se obtuvo patrones asimétricos por donde fluye la corriente.

De tal manera, como es de esperar, los patrones por donde fluye la corriente cambia drásticamente cuando se omite el potencial para suprimir los efectos de borde. Esto debido a que el haz de electrones ahora puede interactuar con todos los bordes de la nanocinta reflejarse e inferir. La formación de los patrones que se observan son únicos: véase el apéndice B. Al cambiar algún parámetro como la energía, el tamaño del sistema o de los contactos, se observa un patrón totalmente diferente para cada parámetro que cambia.

En particular, al observar la figuras 4.12 c) y 4.11 b), a mayor profundidad se aprecia un diferencia muy grande. Es interesante, como llega mucho más el flujo local de corriente al contacto drenaje (D), en presencia de efectos de borde; mientras que en el caso contrario (al suprimir los efectos de borde) esto no sucede de la misma manera, sino que parece que el flujo local de corriente se va perdiendo por los bordes del sistema.

Conclusiones

Esta tesis está dedicada al estudio del transporte electrónico en nanocintas de Fosforeno, donde el análisis de los resultados fue particularmente enfocado a la fuerte anisotropía que presenta el material. Al ser sujeta la nanocinta a un campo magnético perpendicular, se presentan como algunas de las propiedades electrónicas (como el flujo local de corriente y la LDOS) cambian debido a este hecho y, por lo tanto, se ven afectadas por el alto carácter anisótropo del material.

Para realizar el cálculo numérico de la corriente local, la LDOS y la resistencia de Hall en nanocintas de Fosforeno, se hace la aproximación de amarre fuerte para obtener el Hamiltoniano del sistema. No obstante, a pesar de que se debe tener en cuenta los 5 parámetros de acoplamiento [35], se hace una aproximación aún más sencilla a los primeros dos vecinos (t_1 y t_2), que describe correctamente la estructura electrónica a bajas energías. Aplicando el método de funciones de Green fuera de equilibrio (NEGF), se realizan los cálculos de haces inyectados desde los distintos bordes de la nanocinta de Fosforeno.

En la primera parte se estudia el magnetotransporte. Después de una breve introducción a la física básica del Fosforeno, en particular se enfoca en el estudio del magnetotransporte a lo largo del límite de una nanocinta de Fosforeno. En este sistema, se inyectan los electrones desde un tipo de borde de la nanocinta (*zigzag* o *armchair*) y se sujeta a un campo magnético perpendicular externo para hacer el análisis de la fuerte anisotropía midiendo la resistencia por el otro tipo de borde; ver la figuras 3.9 y 3.8, Dicha resistencia se calcula con la resistencia de Hall generalizada a 4-puntas (3.23) [51] (resistencia transversal R_{xy}) a partir del método de NEGF. Uno de los principales resultados de esta tesis es el espectro de energías numérico que va de acuerdo con la ecuación (4.5). Estas energías van de acuerdo con los cálculos numéricos de la densidad de estados (DOS), en función del campo magnético y de la energía, ver figura 4.1, donde se puede observar claramente el llamado abanico de Landau. También, se muestra la resistencia de Hall en función del campo magnético; en la figuras 4.2 y 4.3 se aprecia con claridad una serie de mesetas extendidas para los dos direcciones cristalinas de alta simetría del Fosforeno. A pesar de la fuerte anisotropía que se presenta, los resultados son casi idénticos, como se espera. En campos débiles la resistencia muestra un comportamiento lineal que se describe desde el régimen clásico. Al aumentar la intensidad del campo magnético, se observa esta serie de mesetas extendidas que demuestra la cuantización de los niveles de Landau; nuevamente el cálculo por el método de NEGF es congruente con (4.5). Por lo tanto, para la resistencia total (4.6) solo es necesario contar el número de estados de borde en la energía de Fermi, la cuál es equivalente al número de niveles de Landau ocupados. Por otra parte, esta situación da lugar a los estados de borde,

que llevan el flujo de electrones a lo largo del borde del sistema; ver figuras 4.4, 4.5 y 4.6. En estas figuras se observa como la fuerte anisotropía afecta a los estados de borde. Se muestra una diferencia espacial importante a lo largo de las dos direcciones debido a las masas anisotrópicas.

En la segunda parte, se estudia el flujo local de corriente como también la densidad local de los estados (LDOS). Específicamente, se consideran tres configuraciones diferentes desde distintos bordes de la estructura: *Zigzag* (paralela al eje y), *Armchair* (paralela al eje x) y una combinación de los dos anteriores, como se muestra en la figura 3.8 respectivamente. Suprimiendo los efectos de borde, la conducción en el espacio real es dominada por los contactos que se encuentran a lo largo de los bordes *Armchair*, mientras que para los contactos en un borde *Zigzag* la conducción se ve concentrada en la dirección de los contactos de la Fuente y Drenaje por la estructura electrónica de banda, véase el apéndice A. Se estudia el flujo local y la LDOS, para observar la dependencia del tamaño de los contactos y de la energía de los electrones inyectados, para los dos direcciones de alta simetría. Al ser inyectado el haz de electrones por una fuente de menor tamaño, se hace presente el fenómeno de difracción debido a que la longitud de Fermi para la energía E es comparable con el tamaño de la fuente. Sin embargo, este fenómeno se hace notar con mayor intensidad cuando los contactos se colocan sobre una estructura *Armchair*, debido a la estructura electrónica; ver figuras 4.7 y 4.9. Ahora, al considerar la dependencia de la energía, se muestra en la LDOS que las intensidades máximas predominan en toda la nanocinta cuando los contactos se encuentran sobre bordes *Zigzag*, ya que la corriente de electrones fluye de manera más homogénea en esta dirección; véase las figuras 4.8 y 4.10. En el caso de considerar efectos de borde, se observan claramente patrones muy particulares y únicos; al cambiar algún parámetro en los cálculos, dichos patrones cambian por completo; véase el apéndice B. Todos estos dispositivos bajo sus diferentes configuraciones son válidos e interesantes en el control y manipulación del flujo local de corriente en nanodispositivos de Fosforeno.

En el panorama de trabajo a futuro, el Fosforeno brinda muchas oportunidades para una mayor ingeniería de estructuras de bandas y, combinando con otros materiales, para el diseño de nuevos nanodispositivos $2D$. Con base en los trabajos teóricos obtenidos hasta ahora, como mediciones del GAP para pocas capas de Fosforeno, detección de altos estados excitados y otras propiedades más [16], se espera que el trabajo realizado en esta tesis inspire a descubrimientos más sobresalientes y sorprendentes, tanto en la física teórica como en las aplicaciones de este material.

Dispersión del haz de electrones

La estructura electrónica de banda a bajas energías se describe mediante la relación (3.10), que posee el fosforeno. Esto hace que el material sea altamente anisotrópico, como se muestra en la figura 3.6. Al tener una energía arbitraria fija alrededor del punto Γ , el plano en las direcciones k_x y k_y se puede representar mediante la figura A.1. Esta figura muestra la inyección de un haz de electrones para las dos direcciones cristalinas de alta simetría.

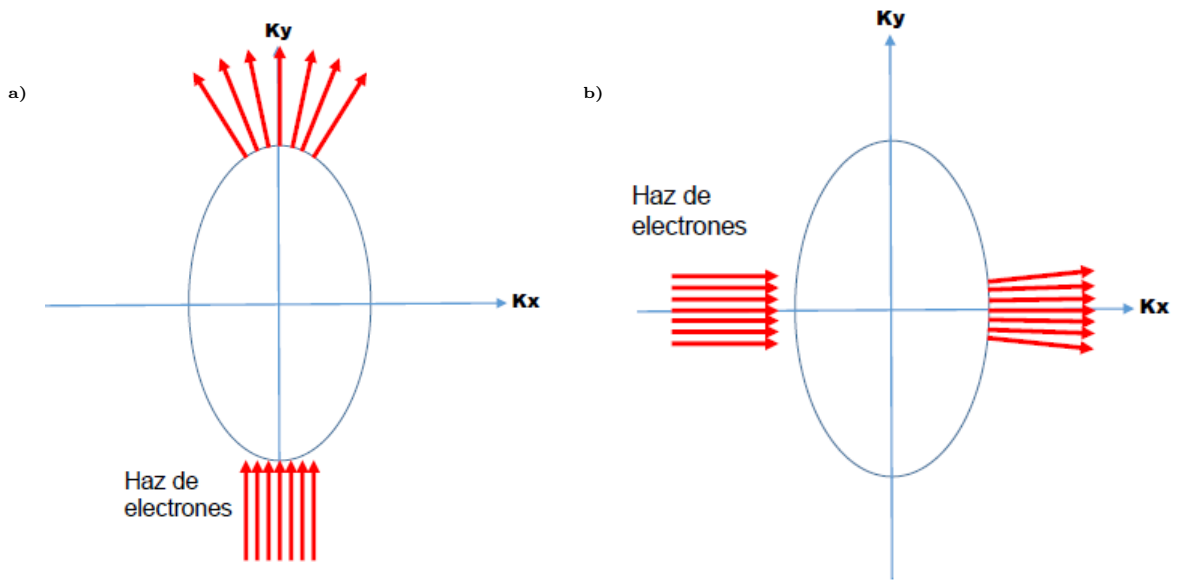


Fig. A.1: Se muestra la inyección del haz de electrones desde dos diferentes direcciones, dado la estructura electrónica del fosforeno. El haz de electrones resultante debe de ser ortogonal respecto a la superficie. En la figura **a)** el haz de electrones se inyecta paralelo al eje k_y y se observa una fuerte dispersión. En la figura **b)** el haz se inyecta paralelo al eje k_x ; mientras que el haz se aleja de la parte central, éste va adquiriendo cada vez una mayor dispersión.

En la figura A.1 **a)** se inyecta un haz de electrones que va de abajo hacia arriba. En esta figura se puede apreciar que al inyectar el haz de electrones desde una dirección paralela al eje k_y , este mismo habrá de sufrir una dispersión considerable, dado que el haz de electrones debe ser ortogonal a la superficie. Este efecto se puede observar en las figuras 4.7 **a)- c)** y 4.8 **a)- c)**.

A. DISPERSIÓN DEL HAZ DE ELECTRONES

En la figura [A.1 b\)](#) el haz de electrones es dirigido de izquierda a derecha. En esta figura se observa que cuando el haz de electrones es inyectado de manera paralela al eje k_x , entonces el haz en la parte central sufrirá de una dispersión mínima. Sin embargo, mientras que el haz de electrones se aleje cada vez más de la parte central, es decir, los extremos de éste, se empezarán a ver afectados por una dispersión. Esta dispersión en los extremos del haz puede observarse en las figuras [4.9 a\)- c\)](#) y [4.10 a\)- c\)](#).

Esta dispersión que afecta el haz de electrones, en ambas direcciones, tanto en el eje k_x y k_y , se debe a causa de la alta anisotropía de la estructura electrónica del fosforeno [[34](#), [36](#), [37](#)].

Tamaño de las nanocintas

A continuación se varía el tamaño de las nanocintas y se muestra el flujo local de corriente considerando los efectos de borde, como consecuencia se obtienen nuevos y diferentes patrones (véase la figura B.1), en comparación con la figura 4.12 a) - c).

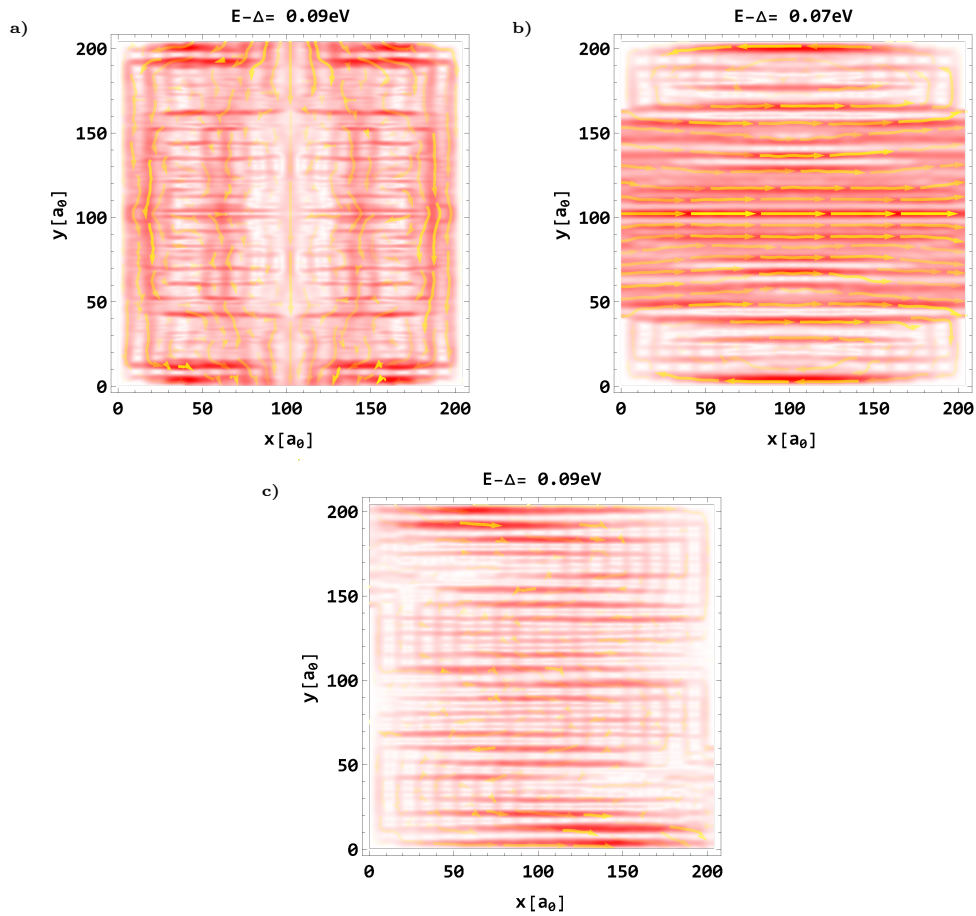


Fig. B.1: Efecto de las dimensiones de la nanocinta. Se muestra el flujo local de corriente de manera análoga a la figura 4.12, bajo las mismas condiciones del contacto de inyección y del drenaje. Al cambiar el tamaño (aproximado) de la nanocinta a $(L_x \times L_y) \approx 200 a_0 \approx 90 \text{ nm}$, se despliegan nuevamente patrones muy interesantes y totalmente distintos a los que se presentan en 4.12.

En la figura B.1 se presenta un tamaño proporcionalmente más pequeño al tamaño utilizado en los resultados obtenidos en el trabajo de esta tesis. En la primer nanocinta, que se muestra en B.1 a), se despliega el flujo local de corriente, los contactos fuente S y drenaje D se encuentran en los límites de los bordes *Armchair*; en la segunda nanocinta, que se presenta en la figura B.1 b), ahora con los contactos en los bordes *Zigzag* y por último la nanocinta que se muestra en B.1 c), los contactos se encuentran en ambos bordes. Al modificar ligeramente el tamaño de la nanocinta, los contactos S y D abarcan un mayor parte del borde la nanocinta, causando que los patrones del flujo local de corriente que se presentan en la figura 4.12 cambien drásticamente, debido a que la interacción entre los electrones y la frontera es única. Es posible hacer una analogía con la mecánica cuántica, donde las patrones que se presentan en las nanocintas se asemejan a la solución de la función de onda en el caso de la partícula en el pozo infinito.

El tamaño de las nanocintas esta determinado por la capacidad de computo a la que tiene acceso el autor. Se puede presentar de manera análoga el caso proporcional al aumentar el tamaño de las nanocintas pero se requiere un mayor poder de computo.

Bibliografía

- [1] Novoselov, Geim, Morozov, Jiang, Z. Y, Dubonos, Grigorieva y Firsov. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, **306**(5696):666-669, 2004. DOI: [10.1126/science.1102896](https://doi.org/10.1126/science.1102896) (citado en la pág. 1).
- [2] S. Nayyar Abbas, L. L. Li, V. Mosallanejad, F. M. Peeters y G.-P. Guo. Transport characteristics of multi-terminal pristine and defective phosphorene systems. *Nanotechnology*, **30**(45):455705, Agosto 2019. DOI: [10.1088/1361-6528/ab3961](https://doi.org/10.1088/1361-6528/ab3961) (citado en las págs. 1, 18, 45).
- [3] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos y A. A. Firsov. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature*, **438**:197-200, Noviembre 2005. DOI: [10.1038/nature04233](https://doi.org/10.1038/nature04233) (citado en la pág. 1).
- [4] M. Houssa, E. Scalise, K. Sankaran, G. Pourtois, V. V. Afanas y A. Stesmans. Electronic properties of hydrogenated silicene and germanene. *Applied Physics Letters*, **98**(22):223107, 2011. DOI: [10.1063/1.3595682](https://doi.org/10.1063/1.3595682) (citado en la pág. 1).
- [5] H. Oughaddou, H. Enriquez, M. R. Tchalala, H. Yildirim, A. J. Mayne, A. Bendounan, G. Dujardin, M. A. Ali] y A. Kara. Silicene, a promising new 2D material. *Progress in Surface Science*, **90**(1):46 -83, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.progsurf.2014.12.003> (citado en la pág. 1).
- [6] Feng, Baojie, Z. Jin, Z. Qing, Li, W. Li, Shuai, L. Hui, C. Peng, M. Sheng, C. Lan y W. Kehui. Experimental realization of two-dimensional boron sheets. *Nature Chemistry*, **8**(6):563-568, 2016. DOI: [10.1038/nchem.2491](https://doi.org/10.1038/nchem.2491) (citado en la pág. 1).
- [7] Tog, Xin, A. Eric, L. Feng, L. Handong y W. Z. M. Advances in MoS₂-Based Field Effect Transistors (FETs). *Nano-Micro Letters*, **7**(3):203-218, 2015. DOI: [10.1007/s40820-015-0034-8](https://doi.org/10.1007/s40820-015-0034-8) (citado en la pág. 1).
- [8] L. Zheng-Hai, L. Ying, C. Can, Z. Shu-Liang, X. J. Tian, X. Jin y C. L. Na. First-principles study of electronic and sodium-ion transport properties of transition-metal dichalcogenides. *International Journal of Modern Physics B*, **32**(20):1850215, 2018. DOI: [10.1142/S0217979218502156](https://doi.org/10.1142/S0217979218502156) (citado en la pág. 1).
- [9] G. Gautam, V. W. G, V. de Put Maarten L, C. Shanmeng, T. Sabyasachi, C. Edward y F. M. V. Theoretical studies of electronic transport in monolayer and bilayer phosphorene: A critical overview. *Phys. Rev. B*, **98**:115416, 11, 2018. DOI: [10.1103/PhysRevB.98.115416](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.115416) (citado en las págs. 1, 2).

- [10] S. Poncé, W. Li, S. Reichardt y F. Giustino. First-principles calculations of charge carrier mobility and conductivity in bulk semiconductors and two-dimensional materials. *Reports on Progress in Physics*, **83**(3):036501, 2020. DOI: [10.1088/1361-6633/ab6a43](https://doi.org/10.1088/1361-6633/ab6a43) (citado en las págs. 1, 42).
- [11] M Houssa, A Dimoulas y A Molle. *2D Materials for Nanoelectronics*. CRC Press, Boca Raton, 2016 (citado en la pág. 1).
- [12] K. W. Youn y K. S. Prediction of very large values of magnetoresistance in a graphene nanoribbon device. *Nature Nanotechnology*, **3**(7):408-412, 2008. DOI: [10.1038/nnano.2008.163](https://doi.org/10.1038/nnano.2008.163) (citado en la pág. 2).
- [13] Z. Fawei, L. Zhirong, W. Jian, D. Wenhui y G. Bing-Lin. Scaling law of the giant Stark effect in boron nitride nanoribbons and nanotubes. *Phys. Rev. B*, **78**:085423, 8, 2008. DOI: [10.1103/PhysRevB.78.085423](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.085423) (citado en la pág. 2).
- [14] S. F, G. F y N. A. H. Castro. Coulomb Blockade in Graphene Nanoribbons. *Phys. Rev. Lett.*, **99**:166803, 16, 2007. DOI: [10.1103/PhysRevLett.99.166803](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.166803) (citado en la pág. 2).
- [15] S. Lei, Z. Minggang, L. Suchun, S. M. B y F. Y. Ping. Electron transmission modes in electrically biased graphene nanoribbons and their effects on device performance. *Phys. Rev. B*, **86**:115419, 11, 2012. DOI: [10.1103/PhysRevB.86.115419](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.115419) (citado en la pág. 2).
- [16] A. Carvalho, M. Wang, X. Zhu, S. Rodin Aleksandr, H. Su, C. Neto y A. H. Phosphorene: from theory to applications. *Nature Reviews Materials*, **1**(11):16061, 2016. DOI: [10.1038/natrevmats.2016.61](https://doi.org/10.1038/natrevmats.2016.61) (citado en las págs. 2, 42, 50).
- [17] W. Xinran, O. Yijian, L. Xiaolin, W. Hailiang, G. Jing y D. Hongjie. Room-Temperature All-Semiconducting Sub-10-nm Graphene Nanoribbon Field-Effect Transistors. *Phys. Rev. Lett.*, **100**:206803, 20, 2008. DOI: [10.1103/PhysRevLett.100.206803](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.206803) (citado en la pág. 2).
- [18] S. Young-Woo, C. M. L y L. S. G. Energy Gaps in Graphene Nanoribbons. *Phys. Rev. Lett.*, **97**:216803, 21, 2006. DOI: [10.1103/PhysRevLett.97.216803](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.216803) (citado en la pág. 2).
- [19] T. Vy, S. Ryan, L. Yufeng e Y. Li. Layer-controlled band gap and anisotropic excitons in few-layer black phosphorus. *Phys. Rev. B*, **89**:235319, 23, 2014. DOI: [10.1103/PhysRevB.89.235319](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.235319) (citado en la pág. 2).
- [20] F. Ruixiang, T. Vy e Y. Li. Topologically protected Dirac cones in compressed bulk black phosphorus. *Phys. Rev. B*, **91**:195319, 19, 2015. DOI: [10.1103/PhysRevB.91.195319](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.195319) (citado en la pág. 2).
- [21] L. Likai, Y. Yijun, Y. G. Jun, G. Qingqin, O. Xuedong, W. Hua, F. Donglai, C. X. Hui y Z. Yuanbo. Black phosphorus field-effect transistors. *Nature Nanotechnology*, **9**(5):372-377, 2014. DOI: [10.1038/nnano.2014.35](https://doi.org/10.1038/nnano.2014.35) (citado en la pág. 2).
- [22] L. Han, N. A. T, Z. Zhen, L. Zhe, X. Xianfan, T. David e Y. P. D. Phosphorene: An Unexplored 2D Semiconductor with a High Hole Mobility. *ACS Nano*, **8**(4):4033-4041, 2014. DOI: [10.1021/nn501226z](https://doi.org/10.1021/nn501226z) (citado en las págs. 2, 42).
- [23] Z. Zhen y T. David. Semiconducting Layered Blue Phosphorus: A Computational Study. *Phys. Rev. Lett.*, **112**:176802, 17, 2014. DOI: [10.1103/PhysRevLett.112.176802](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.176802) (citado en la pág. 2).
- [24] G. Jie, Z. Zhen y T. David. Phase Coexistence and Metal-Insulator Transition in Few-Layer Phosphorene: A Computational Study. *Phys. Rev. Lett.*, **113**:046804, 4, 2014. DOI: [10.1103/PhysRevLett.113.046804](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.046804) (citado en la pág. 2).
-

- [25] T. Stegmann. *Quantum transport in nanostructures: from the effects of decoherence on localization to magnetotransport in two-dimensional electron system*. Tesis doctoral, Die Universität Duisburg-Essen, 2014 (citado en las págs. 5, 6, 11, 25, 27-30).
- [26] S. Datta. *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge University Press, 1995. DOI: [10.1017/CB0978511805776](https://doi.org/10.1017/CB0978511805776) (citado en las págs. 5, 26, 29).
- [27] S. Datta. *Quantum transport: atom to transistor*. Cambridge, 2005. DOI: [10.1017/cbo9781139164313](https://doi.org/10.1017/cbo9781139164313) (citado en las págs. 5, 27).
- [28] S. S. H. *Lecture Notes for State Solid Physics*. Oxford, 2011, páginas 77-86 (citado en la pág. 5).
- [29] R. P. Feynman, L. R. B. y S. M. *The Feynman Lectures on Physics*, volumen 3. Addison-Wesley, 1963 (citado en la pág. 6).
- [30] D. R. Hofstadter. Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields. *Phys. Rev. B*, **14**:2239-2249, 6, 1976. DOI: [10.1103/PhysRevB.14.2239](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.14.2239) (citado en la pág. 6).
- [31] R. Peierls. Zur Theorie des Diamagnetismus von Leitungselektronen. *Z. Physik*, **80**:763-791, 1933. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01342591> (citado en la pág. 6).
- [32] R. Landauer. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction (and comment). *Journal of Mathematical Physics*, **37**(10):5259-5268, 1996. DOI: [10.1063/1.531590](https://doi.org/10.1063/1.531590) (citado en la pág. 14).
- [33] R. Landauer. Electrical transport in open and closed systems. *Z. Physik B - Condensed Matter*, (68):217-228, 1987. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01304229> (citado en la pág. 14).
- [34] Y. Betancur-Ocampo, F. Leyvraz y T. Stegmann. Electron Optics in Phosphorene pn Junctions: Negative Reflection and Anti-Super-Klein Tunneling. *Nano Letters*, **19**(11):7760-7769, 2019. DOI: [10.1021/acs.nanolett.9b02720](https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.9b02720) (citado en las págs. 17, 19-25, 52).
- [35] A. N. Rudenko y M. I. Katsnelson. Quasiparticle band structure and tight-binding model for single- and bilayer black phosphorus. *Phys. Rev. B*, **89**:201408, 20, 2014. DOI: [10.1103/PhysRevB.89.201408](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.201408) (citado en las págs. 17-21, 49).
- [36] E. Taghizadeh Sisakht, M. H. Zare y F. Fazileh. Scaling laws of band gaps of phosphorene nanoribbons: A tight-binding calculation. *Phys. Rev. B*, **91**:085409, 8, 2015. DOI: [10.1103/PhysRevB.91.085409](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.085409) (citado en las págs. 17, 18, 22, 52).
- [37] E. Motohiko. Electrically Tunable Quasi-Flat Bands, Conductance and Field Effect Transistor in Phosphorene. *arXiv e-prints*:arXiv:1404.5788, 2014 (citado en las págs. 17, 22, 52).
- [38] A. N. Rudenko, S. Yuan y M. I. Katsnelson. Toward a realistic description of multilayer black phosphorus: From GW approximation to large-scale tight-binding simulations. *Phys. Rev. B*, **92**:085419, 8, 2015. DOI: [10.1103/PhysRevB.92.085419](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.085419) (citado en las págs. 18, 21).
- [39] A. A. Mostofi, J. R. Yates, Y.-S. Lee, I. Souza, D. Vanderbilt y N. Marzari. wannier90: A tool for obtaining maximally-localised Wannier functions. *Computer Physics Communications*, **178**(9):685-699, 2008. ISSN: 0010-4655. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2007.11.016> (citado en la pág. 19).

- [40] N. Marzari, A. A. Mostofi, J. R. Yates, I. Souza y D. Vanderbilt. Maximally localized Wannier functions: Theory and applications. *Rev. Mod. Phys.*, **84**:1419-1475, 4, 2012. DOI: [10.1103/RevModPhys.84.1419](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.84.1419) (citado en la pág. 19).
- [41] H. N. Fernández Escamilla. *Estructura y Reactividad en superficies de fosforeno*. Tesis doctoral, Universidad Autónoma de Nuevo León, 2018. URL: <http://eprints.uanl.mx/16721/> (citado en la pág. 20).
- [42] E. A. de la Cruz Nuñez Andrade. *Estudio de la respuesta óptica de estructuras atómicas de monocapa de Fósforo Negro*. Tesis de maestría, Centro de Investigaciones en Óptica A.C. (León Guanajuato), 2018 (citado en las págs. 20, 21).
- [43] L. C. L. Y. Voon, A Lopez-Bezanilla, J Wang, Y Zhang y M Willatzen. Effective Hamiltonians for phosphorene and silicene. *New Journal of Physics*, **17**(2):025004, 2015. DOI: [10.1088/1367-2630/17/2/025004](https://doi.org/10.1088/1367-2630/17/2/025004) (citado en las págs. 20, 32).
- [44] Y. Betancur-Ocampo, E. Paredes-Rocha y S. Thomas. Phosphorene pnp junctions as perfect electron waveguides. *Journal of Applied Physics*, **128**(11):114303, 2020. DOI: [10.1063/5.0019215](https://doi.org/10.1063/5.0019215) (citado en las págs. 21, 22).
- [45] V. M. Pereira, A. H. Castro Neto y N. M. R. Peres. Tight-binding approach to uniaxial strain in graphene. *Phys. Rev. B*, **80**:045401, 4, 2009. DOI: [10.1103/PhysRevB.80.045401](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.045401) (citado en la pág. 22).
- [46] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov y A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, **81**:109-162, 1, 2009. DOI: [10.1103/RevModPhys.81.109](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109) (citado en las págs. 22, 24).
- [47] P Avouris, T. F. Heinz, T Low y Eds. *2D Materials: Properties and Devices*. Cambridge University Press, 2017, páginas 381-387 (citado en las págs. 23, 24).
- [48] M. Büttiker. Four-Terminal Phase-Coherent Conductance. *Phys. Rev. Lett.*, **57**:1761-1764, 14, 1986. DOI: [10.1103/PhysRevLett.57.1761](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.57.1761) (citado en la pág. 27).
- [49] M. Buttiker. Symmetry of electrical conduction. *IBM Journal of Research and Development*, **32**(3):317-334, 1988. DOI: [10.1147/rd.323.0317](https://doi.org/10.1147/rd.323.0317) (citado en la pág. 27).
- [50] T Stegmann, D. E. Wolf y A Lorke. Magnetotransport along a boundary: from coherent electron focusing to edge channel transport. *New Journal of Physics*, **15**(11):113047, 2013. DOI: [10.1088/1367-2630/15/11/113047](https://doi.org/10.1088/1367-2630/15/11/113047) (citado en la pág. 28).
- [51] H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, M. E. I. Broekaart, P. H. M. van Loosdrecht, B. J. van Wees, J. E. Mooij, C. T. Foxon y J. J. Harris. Coherent electron focusing with quantum point contacts in a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. B*, **39**:8556-8575, 12, 1989. DOI: [10.1103/PhysRevB.39.8556](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.39.8556) (citado en las págs. 28, 49).
- [52] Quantum Transport in Semiconductor Nanostructures. ISSN: 0081-1947 (citado en la pág. 29).
- [53] R. E. Prange y S. M. Girvin. *The Quantum Hall Effect*. Springer, 1987 (citado en la pág. 29).
- [54] L. C. Lew Yan Voon y M. Willatzen. *The k p Method*. Springer, 2009 (citado en la pág. 32).
- [55] K. v. Klitzing, G. Dorda y M. Pepper. New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance. *Phys. Rev. Lett.*, **45**:494-497, 6, 1980. DOI: [10.1103/PhysRevLett.45.494](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.45.494) (citado en la pág. 34).
- [56] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi y S.-C. Zhang. Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells. *Science*, **318**(5851):766-770, 2007. DOI: [10.1126/science.1148047](https://doi.org/10.1126/science.1148047) (citado en la pág. 34).

- [57] S. Oh. The Complete Quantum Hall Trio. *Science*, **340**(6129):153-154, 2013. DOI: [10.1126/science.1237215](https://doi.org/10.1126/science.1237215) (citado en la pág. [34](#)).
- [58] M. Abramowitz e I. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications, 1972 (citado en la pág. [41](#)).
- [59] T. Stegmann y N. Szpak. Current flow paths in deformed graphene: from quantum transport to classical trajectories in curved space. *New Journal of Physics*, **18**(5):053016, 2016. ISSN: 1367-2630. DOI: [10.1088/1367-2630/18/5/053016](https://doi.org/10.1088/1367-2630/18/5/053016) (citado en la pág. [42](#)).

