



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

TRANSPORTE ELECTRÓNICO EN MÚLTIPLES CAPAS
DE FOSFORENO

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

P R E S E N T A :

ARMANDO QUETZALCOATL ARCINIEGA GUTIÉRREZ

TUTOR

DR. THOMAS WERNER STEGMANN



CDMX, CIUDAD UNIVERSITARIA, 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
Arciniega
Gutiérrez
Armando Quetzalcoatl
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física
312116798
2. Datos de tutor
Dr.
Thomas
Werner
Stegmann
3. Datos del Sinodal 1 (Presidente)
Dr.
José Alberto
Martín
Ruiz
4. Datos del Sinodal 2 (Vocal)
Dra.
Roxana Mitzayé
Del Castillo
Vázquez
5. Datos del Sinodal 3 (Suplente)
Dr.
Rafael Alberto
Méndez
Sánchez
6. Datos del Sinodal 4 (Suplente)
Dr.
José Eduardo
Barrios
Vargas

"Todavía hay muchas cosas preciosas sobre la Tierra y grandes cosas por hacer, y el valor de la vida está determinado al final por la forma en que es vivida. Así que uno vuelve una y otra vez a su deber de seguir adelante y mostrar a sus seres más queridos el mismo amor que uno quisiera experimentar para sí mismo."

Max Planck

Dedicatoria

Para mi familia...

A mis papás, que siempre me han dado su apoyo incondicional en buenos y malos momentos. No hay palabras para describir lo buenos padres que han sido, siempre dando lo mejor de ustedes para sacar adelante cualquier situación con la mejor de las actitudes. Si he llegado a este punto de mi vida ha sido solo por ustedes. Gracias por formar esta hermosa familia.

Para mis hermanos, de confianza infinita, gracias por llenar mi vida de alegría y felicidad. Si existe una definición de lo que es ser un hermano esa son ustedes. Nunca duden de sus capacidades y lo lejos que pueden llegar, su camino es suyo y solamente suyo, escriban su propia historia.

Agradecimientos

Gracias a todos aquellos que ayudaron en el proceso de este trabajo, agradezco su paciencia y su apoyo para la culminación del mismo.

Muchas gracias Thomas, por darme la oportunidad de trabajar contigo, por guiarme en cada proceso y por tu paciencia para desarrollar esta tesis.

Gracias a Marisol, tutora y también amiga, por las oportunidades que me has dado y el apoyo tanto académico como personal desde que era muy joven.

Agradecido con mis compañeros y amigos de la carrera, los *bosones*, siempre será un gusto regresar y tomar pan y café a la sombra del Prometeo.

Gracias a todos mis amigos del equipo de clavados, que en cada entrenamiento me hicieron sentir como en familia, me hicieron crecer como deportista y como persona.

A todos mis amigos de *Bécalos*, que me motivaron y me dieron inspiración para alcanzar nuevas metas.

Se agradece el apoyo técnico de la M. en Aud. Reyna Elizabeth Caballero Cruz y por el espacio brindado en el Laboratorio de Sistemas Computacionales y Físicas de la Facultad de Ciencias.

Agradezco a todos mis sinodales por aceptar revisar este trabajo y por darme sus valiosos comentarios.

Por último, gracias a los proyectos CONACYT A1-S-13469, UNAM-PAPIIT IA103020 y IN103922 que apoyaron al desarrollo del presente escrito.

Resumen

Estudiamos el transporte electrónico en varias capas de Fosforeno utilizando un Hamiltoniano de amarre fuerte para la descripción energética. Este estudio se realizó con el método de las funciones de Green fuera de equilibrio. A partir de ellas, se obtuvieron los resultados de transmisión y corriente local.

De acuerdo con los resultados que obtuvimos de la transmisión o bien la conductancia, calculamos la brecha de banda de un sistema de múltiples capas de Fosforeno. Observamos que existe una relación entre la brecha de energía donde no se tiene transmisión y el *band gap* de un sistema de varias capas de Fosforeno. Cuando el número de capas aumenta el *band gap* del sistema disminuye de acuerdo a un modelo analítico previamente propuesto. Se observó la alta anisotropía en la estructura de bandas respecto a la dirección de transporte.

Con los contactos de entrada y salida de electrones en diferentes configuraciones, obtuvimos las gráficas de densidad y del campo vectorial de corriente local de un sistema de varias capas. En estas gráficas de densidad de corriente, observamos transporte regular del contacto de entrada al contacto de salida. Tanto en la dirección x como en y el flujo entre capas depende de la configuración de contactos.

Además de esto, se agregó un potencial electrostático para desplazar la estructura de bandas con el objetivo de crear una unión *pn* en las cintas de Fosforeno. Se observó, que cuando se tiene los contactos en el borde *zigzag* existe transmisión de electrones. Sin

embargo, cuando los contactos de entrada y salida se encuentran en el borde *armchair*, se mantiene presente el efecto de túnel Anti-Super-Klein, ya observado en el sistema de una capa de Fosforeno. Este efecto consiste en la reflexión total de los electrones en la interfaz de la unión *pn*.

Adicional a lo anterior, se doparon las cintas de Fosforeno a partir de un potencial variable, debido a que en un caso más realista un campo eléctrico constante proviene de un gradiente de potencial eléctrico. Se observó, que sigue existiendo transporte cuando se tienen los contactos conectados en el borde *zigzag*, mientras que cuando se tienen los contactos conectados en el borde *armchair* el efecto de túnel Anti-Super-Klein persiste con excepción de pequeñas pérdidas observadas en una escala logarítmica.

Abstract

We study the electronic transport in many layers of Phosphorene using a tight binding Hamiltonian for the energetic description. This study was carried out using the method of Non-Equilibrium Green's Functions (NEGF). Starting from them, we obtained the results of transmission and local current.

According to the results we obtained from transmission or conductance, we calculated the *band gap* of a multilayer system of Phosphorene. We observe that there is a relationship between the energy gap where there is no transmission and the *band gap* of a multilayer system of Phosphorene. When the number of layers increases, the *band gap* of the system decreases according to a previously proposed analytical model. We observed a high anisotropy in the band structure with respect to the transport direction.

With the electron input and output contacts in different configurations, we obtained the local current vector field and density plots of a multilayer system. In these current density plots, we observe regular transport from the input contact to the output contact. In both directions, x and y , the flow between the layers depends on the contact configuration.

In addition to this, an electrostatic potential was added to displace the band structure in order to create a *pn* junction in the Phosphorene nanoribbons. We observed an electron transmission when the contacts are on the *zigzag* boundary. However, when the input and output contacts are on the *armchair* edge, the Anti-Super-Klein tunneling

effect, that was already observed in the one-layer Phosphorene system, remains strongly present. This effect consists of the total reflection of the electrons at the pn junction interface.

In addition to the above, we doped the Phosphorene nanoribbons with a variable potential, because in a more realistic case a constant electric field comes from an electric potential gradient. It was observed that transport continues to exist when the contacts are connected at the *zigzag* edge, while when the contacts are connected at the *arm-chair* border, the Anti-Super-Klein tunneling effect persists with the exception of small losses observed on a logarithmic scale.

Índice general

Dedicatoria	III
Agradecimientos	IV
Resumen	V
Abstract	VII
Introducción	1
1. El Fosforeno, múltiples capas de Fosforeno y sus modelos de amarre fuerte	4
1.1. ¿Qué es el Fosforeno?	4
1.2. Modelando el Fosforeno: Hamiltoniano de amarre fuerte	6
1.3. Hamiltoniano de amarre fuerte para varias capas de Fosforeno	7
1.4. Unidades	9
1.5. Solución del Hamiltoniano de amare fuerte: estructura de bandas	9
1.6. Estructura de bandas de múltiples capas de Fosforeno	11
2. Sobre el transporte cuántico: funciones de Green fuera de equilibrio	14
2.1. ¿Por qué fluyen los electrones? Sistema fuera de equilibrio	14
2.2. <i>Fuente y drenaje</i> en el Fosforeno	16

2.3.	La función espectral A	17
2.4.	Funciones de Green G y G^\dagger	18
2.5.	La función de correlación G^n	19
2.6.	Función de Green para el nanosistema	19
2.7.	Ecuaciones de corriente y transmisión del nanosistema	23
3.	Las distintas configuraciones de <i>fuentes</i> y <i>drenaje</i>	25
3.1.	<i>Fuente</i> y <i>drenaje</i> en todas las capas	25
3.2.	<i>Fuente</i> en la capa inferior y <i>drenaje</i> en la capa superior	26
3.3.	<i>Fuente</i> y <i>drenaje</i> en la capa media	27
3.4.	<i>Fuente</i> y <i>drenaje</i> en configuración <i>ceiling</i>	27
3.5.	<i>Fuente</i> y <i>drenaje</i> en configuración <i>cruzado</i>	28
4.	La brecha de banda del Fosforeno	29
4.1.	Transmisión en una capa de Fosforeno	29
4.2.	Transmisión en múltiples capas de Fosforeno	31
4.3.	La brecha de banda de múltiples capas de Fosforeno	32
5.	Transporte electrónico en múltiples capas de Fosforeno	36
5.1.	Transporte electrónico en una capa de Fosforeno	36
5.2.	Transporte con <i>fuentes</i> y <i>drenaje</i> en el borde zigzag	38
5.2.1.	<i>Fuente</i> y <i>drenaje</i> en todas las capas	38
5.2.2.	<i>Fuente</i> en la capa superior y <i>drenaje</i> en la capa inferior	41
5.2.3.	<i>Fuente</i> y <i>drenaje</i> en la capa intermedia	43
5.3.	Transporte con <i>fuentes</i> y <i>drenaje</i> en el borde armchair	45
5.3.1.	<i>Fuente</i> y <i>drenaje</i> en todas las capas	45
5.3.2.	<i>Fuente</i> en la capa inferior y <i>drenaje</i> en la capa superior	47
5.3.3.	<i>Fuente</i> y <i>drenaje</i> en la capa intermedia	49

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	XI
6. Efecto túnel Anti-Super-Klein en múltiples capas de Fosforeno	52
6.1. Unión pn en el Fosforeno	52
6.2. El efecto túnel Anti-Super-Klein en una capa de Fosforeno	54
6.3. Transporte en uniones pn de varias capas de Fosforeno con <i>fuentes</i> y <i>drenaje</i> sobre el borde zigzag	57
6.4. Transporte en uniones pn de varias capas de Fosforeno con <i>fuentes</i> y <i>drenaje</i> sobre el borde armchair	61
7. Dopaje a través de un potencial variable	65
7.1. Un modelo más realista: potencial variable	65
7.2. Transporte en uniones pn de varias capas de Fosforeno con potencial variable y los contactos sobre el borde zigzag	67
7.3. Transporte en uniones pn de varias capas de Fosforeno con potencial variable y los contactos sobre el borde armchair	71
8. Conclusiones	75
A. Hamiltoniano <i>mono-layer</i>	78
Bibliografía	81

Introducción

En el año de 1956 John Bardeen, Walter H. Brattain y William B. Shockley ganan conjuntamente el premio Nobel de Física por *sus investigaciones en semiconductores y el descubrimiento del efecto transistor*. Desde entonces el crecimiento en dispositivos como micro-procesadores han avanzado de forma progresiva. Asimismo, el 19 de abril de 1965 Gordon Earl Moore, cofundador de la compañía Intel, publicó en la revista *Electronics* el artículo *Cramming more components onto integrated circuits* [1], en donde predecía que aproximadamente cada dos años se duplicaría el número de transistores en un micro-procesador. Esta predicción la conocemos como la *Ley de Moore*, sobre la cual hemos constatado su cumplimiento hasta la actualidad, ver Figura 1.

Por consiguiente, el crecimiento exponencial de los transistores no puede continuar indefinidamente. Se calcula, que aproximadamente para el año 2030 se tendrán que introducir nuevos conceptos para lograr aumentar el poder computacional. Esto, debido a que estos dispositivos comienzan a llegar a los límites de tamaño atómicos, las leyes de la física cuántica comienzan a ser relevantes en las propiedades de los dispositivos electrónicos.

Décadas después, en el año 2010 el premio Nobel de Física fue otorgado a Andre Geim y a Konstantin Novoselov por sus *experimentos innovadores con respecto del material bidimensional Grafeno*¹. A partir de ese momento se intensificó la carrera en el estudio y desarrollo de materiales bidimensionales, ya que estos presentan propiedades pro-

¹Información adicional en www.nobelprize.org

metedoras para desarrollar dispositivos electrónicos más pequeños y más económicos, además de ser de gran interés para su investigación científica.

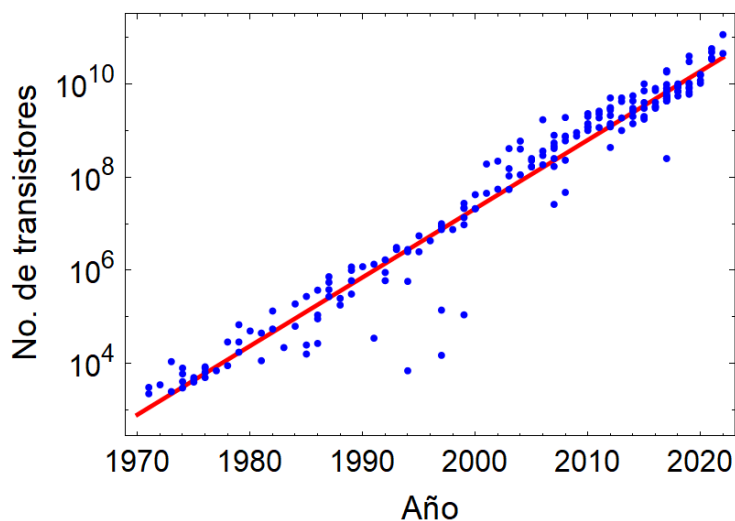


Figura 1: Ley de Moore. Se tiene el año y el número de transistores que ha tenido un micro-procesador individual a través de la historia. En esta gráfica, a cada año le pueden corresponder múltiples datos del número de transistores debido a que, en ese año se desarrollaron varios procesadores de distintas compañías. Datos obtenidos de [2].

Desde el año 2020 a la actualidad (2022) a causa de la pandemia generada por *COVID 19* hemos visto una escasez de micro-procesadores, cuyos componentes principales están hechos a base de Silicio, esto ha resultado en la escasez y encarecimiento de múltiples dispositivos electrónicos, desde teléfonos celulares hasta automóviles. Es por ello, que la motivación de este trabajo es contribuir en el desarrollo de materiales bidimensionales, con el objetivo de migrar de dispositivos hechos a base de semiconductores clásicos a nuevos materiales, o bien, de crear nuevos dispositivos que no son posibles desarrollar con materiales semiconductores comunes.

En esta tesis, se estudian las propiedades electrónicas del Fosforeno, en particular se estudia el transporte electrónico a través de múltiples capas de este. Esto debido a que, con las técnicas actuales resulta complicado sintetizar el Fosforeno monocapa y en

muchos de los casos se obtienen varias capas de este material. Además de esto, es de gran interés científico investigar las propiedades electrónicas de este material, es decir, como se comportan los electrones cuando estos atraviesan múltiples capas de Fosforeno.

Capítulo 1

El Fosforeno, múltiples capas de Fosforeno y sus modelos de amarre fuerte

1.1. ¿Qué es el Fosforeno?

El Fósforo negro, un alótropo del Fósforo, es un material compuesto de múltiples y delgadas capas apiladas de *Fosforeno*. El Fosforeno se considera un material bidimensional, el cual consiste de una red de átomos de Fósforo acomodados en forma hexagonal, o bien, como en forma de un panal de abejas. A diferencia del Grafeno, el Fosforeno presenta una red hexagonal altamente deformada y un *buckling* o *pandeo* entre algunos de sus átomos, muy parecido al corrugamiento del cartón de una caja.

Desde la vista axial superior de una capa de Fosforeno, ver Figura 1.1(a), se puede observar su estructura hexagonal altamente deformada. Y desde una vista lateral, ver Figura 1.1(c) se puede notar la característica principal del Fosforeno, el *pandeo* entre algunos de sus átomos, creando una especie de subcapas, una subcapa superior (átomos rojos) y una inferior (átomos azules), Figura 1.1(c).

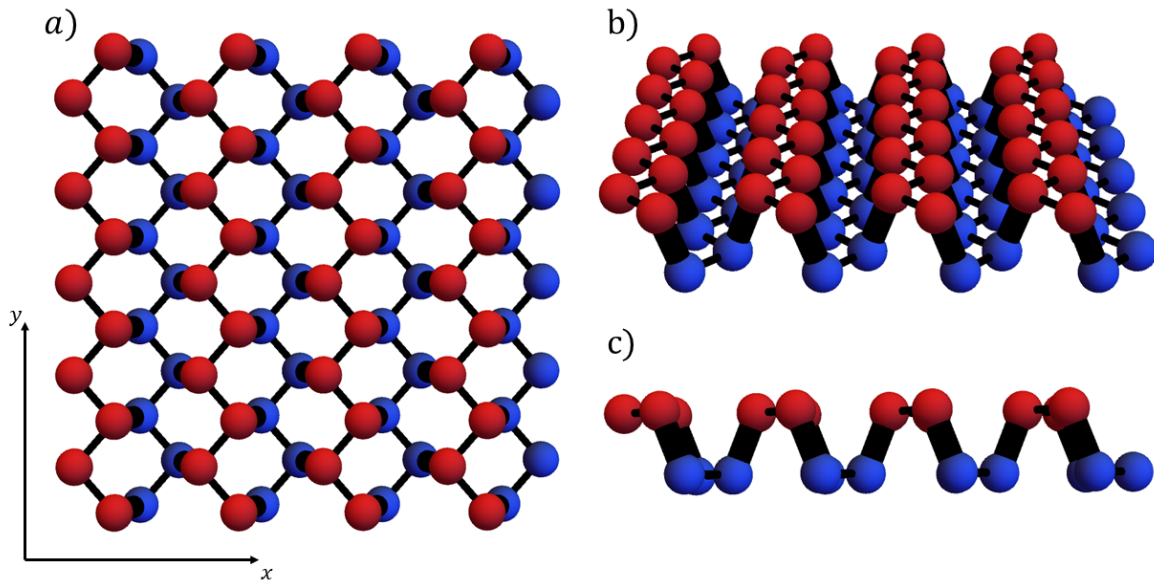


Figura 1.1: Estructura del Fosforeno. En la capa de abajo se encuentran los átomos de color azul y los de color rojo se encuentran en la capa superior. En (a) se tiene una vista superior de una cinta de Fosforeno y se aprecia el arreglo hexagonal de los átomos. En (b) la vista inclinada y en (c) una vista lateral donde se distingue el pandeo (*buckling*) o bien la deformación característica que tiene el Fosforeno.

Una red de Grafeno se construye a partir de una base de vectores triangular con 2 átomos en la celda unitaria, sin embargo, en el Fosforeno esta base no reproduce el pandeo (*buckling*) entre átomos, por ello que se opta por usar una base rectangular con 4 átomos en la celda unitaria. En otras palabras, las posiciones de los átomos están determinadas por los 4 átomos de la base atómica y la combinación lineal del conjunto de vectores base \mathbf{a} , \mathbf{b} y δ ilustrados en la Figura 1.2, y cuyas magnitudes son 4.42\AA , 3.27\AA y 0.8\AA , respectivamente [3]. Los vectores \mathbf{a} y \mathbf{b} forman la base de la celda unitaria del Fosforeno. A partir de estos vectores y los 4 átomos de la base atómica se puede localizar las posiciones de todos los átomos en la red.

Para simplificar la descripción energética de la red del Fosforeno podemos despreciar el pandeo y proyectar las posiciones de los átomos de Fósforo al plano xy . En este caso el sistema se describe por la base triangular con dos átomos en la celda unitaria.

Para este modelo se han considerado únicamente enlaces entre primeros y segundos

vecinos, con energías de enlace $t_1 = -1.22$ eV y $t_2 = 3.665$ eV respectivamente. La clara diferencia entre los parámetros de enlace es lo que le da al Fosforeno propiedades electrónicas muy distintas del Grafeno [4, 5]. Notar que ($t_2 \approx -3t_1$).

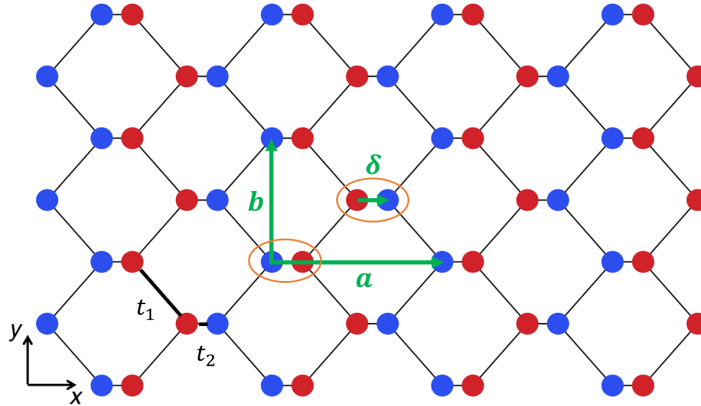


Figura 1.2: Red de Fosforeno proyectada en el plano xy . Los vectores \mathbf{a} (4.42\AA) y \mathbf{b} (3.27\AA) forman la base rectangular para localizar los átomos de Fósforo en toda la red. La base atómica de los 4 átomos se encuentra indicada en las elipses de color naranja. El vector $\boldsymbol{\delta}$ (0.8\AA) conecta los átomos de la capa inferior (átomos azules) con la capa superior (átomos rojos). Los valores $t_1 = -1.22$ eV y $t_2 = 3.665$ eV son los parámetros de enlace de primeros y segundos vecinos respectivamente.

De forma análoga al Grafeno, los bordes a lo largo de la dirección x se les conoce como bordes *armchair* por su forma de *sillón* y los bordes en la dirección y se les conoce como bordes *zigzag* por su forma ondulada, ver Figura 1.2.

1.2. Modelando el Fosforeno: Hamiltoniano de amarre fuerte

Para modelar la estructura electrónica del Fosforeno, utilizamos un Hamiltoniano de amarre fuerte, el cual consiste en la superposición de los estados atómicos de átomos individuales de Fósforo. El Hamiltoniano de amarre fuerte para una sola capa

($ml = mono-layer$) de Fosforeno es

$$H^{ml} = \sum_{\langle i,j \rangle} (t_{ij}|i\rangle\langle j| + \text{H.c.}), \quad (1.1)$$

donde $|i\rangle$ indica el estado de los átomos que se encuentran localizados en la posición \mathbf{R}_i . El valor t_{ij} es el término de acoplamiento entre el estado con posición \mathbf{R}_i y \mathbf{R}_j con posición ij en la matriz del Hamiltoniano y H.c es el término Hermitiano conjugado. El término $\langle i, j \rangle$ indica que la suma en la ecuación (1.1) es distinta de cero únicamente cuando los átomos son primeros o segundo vecinos, en cualquier otro caso el término t_{ij} es igual a cero.

En síntesis, el Hamiltoniano se puede visualizar como una estructura de puntos localizados en \mathbf{R}_i ligados entre sí con una energía de enlace t_{ij} , dependiendo si son o no primeros o segundos vecinos. Sin embargo, el Hamiltoniano no da información acerca de las posiciones atómicas sólo nos da información acerca de la interacción energética.

1.3. Hamiltoniano de amarre fuerte para varias capas de Fosforeno

Por otro lado, como el objetivo principal es estudiar el transporte de los electrones a través de múltiples capas de Fosforeno, definimos a N como el número de capas a estudiar. Para modelar múltiples capas de Fosforeno se considera una aproximación usando la suma de N Hamiltonianos de una sola capa ($ml = mono-layer$) H^{ml} más un término de interacción entre capas vecinas H^{int} ($int = interaction$). Así, el Hamiltoniano para N capas de Fosforeno se puede expresar como

$$H_N = \sum_{m=1}^N H_m^{ml} + \sum_{m=1}^{N-1} H_m^{int}, \quad (1.2)$$

donde

$$H_m^{int} = t_{il} \sum_{\langle i,j \rangle} (|i_m\rangle\langle j_{m+1}| + \text{H.c.}), \quad (1.3)$$

siendo $t_{il} = 0.295 \text{ eV} \approx 0.24|t_1|$ el término de acoplamiento entre capas ($il = \text{intra-layer}$) [6] y H.c. el término Hermitiano conjugado. La interacción entre capas sólo se da con la capa más cercana, es decir, la primera capa vecina. Para este modelo de varias capas se ha considerado un apilamiento-*AB* o *stacking-AB*, el cual es la configuración energéticamente más estable [7].

Para ejemplificar el modelo de amarre fuerte de varias capas, en el caso particular cuando $N = 2$, se tienen 2 Hamiltonianos de amarre fuerte mono-layer H_1^{ml} y H_2^{ml} y un sólo Hamiltoniano de interacción para estas 2 capas H_1^{int} . En la Figura 1.3 se esquematizan dos capas de Fosforeno y a que sección corresponde cada Hamiltoniano.

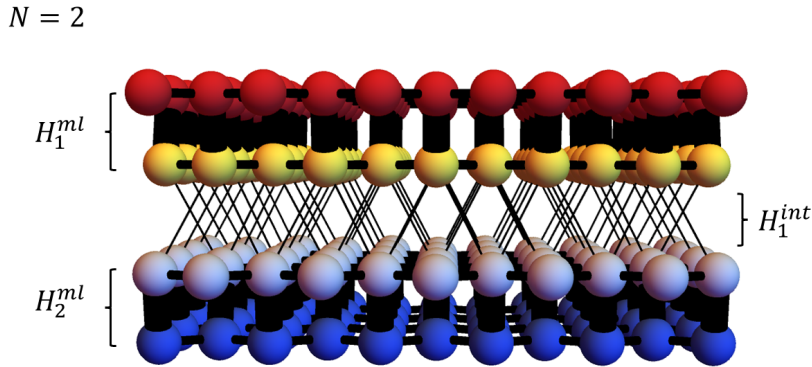


Figura 1.3: Diagrama de representación de los Hamiltonianos para $N = 2$. Las líneas negras entre capas representan los enlaces entre los átomos. H_1^{ml} es el Hamiltoniano de amarre fuerte monocapa que corresponde a la capa de Fosforeno superior. H_2^{ml} representa el modelo de la capa de Fosforeno inferior. H_1^{int} es el Hamiltoniano de interacción entre la capa superior y la inferior.

Otra situación similar es cuando se tienen $N = 3$ capas de Fosforeno, de forma análoga se tiene 3 Hamiltonianos (*mono-layer*) de amarre fuerte H_1^{ml} , H_2^{ml} y H_3^{ml} , y además se tienen 2 Hamiltonianos de acoplamiento entre capas (*intra-layer*) que son H_1^{il} y H_2^{il} . En la Figura (1.4) se representa esquemáticamente a donde corresponde cada término

del Hamiltoniano H_3 .

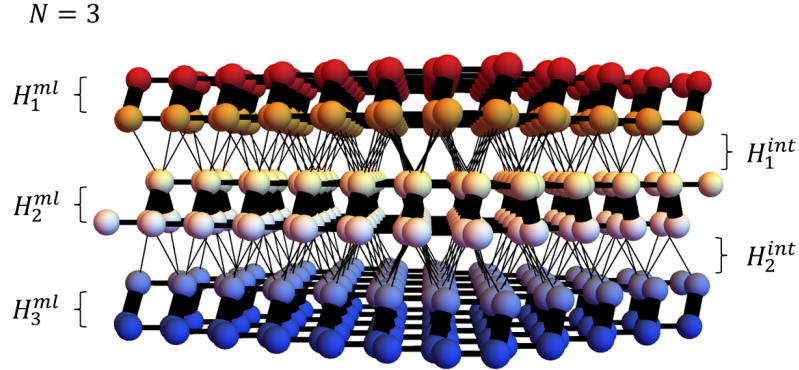


Figura 1.4: Diagrama de representación de los Hamiltonianos para $N = 3$. H_1^{ml} , H_2^{ml} y H_3^{ml} son los modelos energéticos (Hamiltonianos de amarre fuerte mono-layer) individuales para las capas de Fosforeno. H_1^{int} y H_2^{int} son los modelos de interacción entre capas.

1.4. Unidades

Para términos prácticos, todas las longitudes mencionadas en esta tesis están medidas en múltiplos de la magnitud del vector \mathbf{a} , $|\mathbf{a}| = 4.42 \text{ \AA}$. Por otra parte, todas las unidades de energía están medidas en términos del parámetro de acoplamiento $|t_1| = 1.22 \text{ eV}$.

1.5. Solución del Hamiltoniano de amarre fuerte: estructura de bandas

Bajo el teorema de Bloch, en un sistema de un sólido periódico podemos hallar solución de la ecuación de Schrödinger con un *ansatz* de onda plana [8]:

$$|\psi\rangle = \sum_j (a|j^A\rangle + b|j^B\rangle)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j}, \quad (1.4)$$

donde i es la unidad imaginaria y \mathbf{k} el vector de onda. Con esto el Hamiltoniano de amarre fuerte se puede reescribir como ¹

$$H^{ml}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & g^*(\mathbf{k}) \\ g(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.5)$$

donde

$$g(\mathbf{k}) = e^{-ik_\delta} \left[t_2 + 2t_1 e^{ik_a/2} \cos\left(\frac{k_b}{2}\right) \right], \quad (1.6)$$

con $k_\delta = \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}$, $k_a = \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}$ y $k_b = \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}$. A partir de esto, usando la ecuación de Schrödinger se puede resolver el problema de eigenvalores

$$\det(H^{ml} - E) = 0, \quad (1.7)$$

y las eigenenergías, que en este caso corresponden a la estructura de bandas, están dadas por

$$E(\mathbf{k}) = \pm |g(\mathbf{k})|, \quad (1.8)$$

o bien, sustituyendo ecuación (1.6) en la ecuación (1.8)

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{t_2^2 + 4t_1 t_2 \cos\left(\frac{k_a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_b}{2}\right) + 4t_1^2 \cos^2\left(\frac{k_b}{2}\right)}, \quad (1.9)$$

con el indicador "+" para la banda de conducción y "-" para la banda de valencia.

En la Figura 1.5 se grafica la energía o bien la estructura de bandas, ecuación (1.9) en función del vector \mathbf{k} .

¹Para una deducción más detallada acerca de la ecuación (1.5) revisar el Apéndice A.

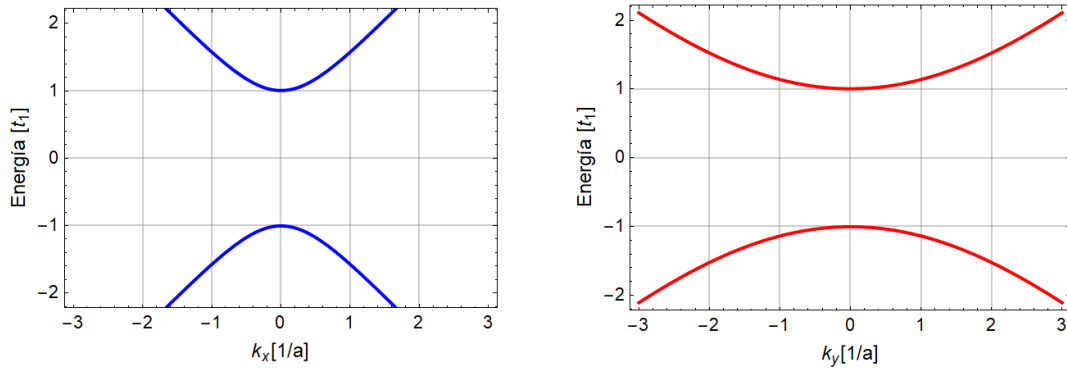


Figura 1.5: Estructura de bandas de una capa de Fosforeno. Del lado izquierdo se tiene la estructura de bandas en la dirección k_x . En el lado derecho se tiene la estructura de bandas en la dirección k_y . Comparando ambas gráficas se puede notar la alta anisotropía que existe en ambas direcciones del Fosforeno.

En la Figura 1.5 se grafica la estructura de bandas de una capa de Fosforeno donde se muestra alta anisotropía que presenta el Fosforeno en ambas direcciones. En la dirección k_x los electrones se comportan como fermiones de Dirac masivos ya que tiene una relación de dispersión cuadrática seguida de un régimen lineal (ver la curva azul en Fig. 1.5). Por otro lado, en la dirección k_y los electrones se comportan como electrones de Schrödinger ya que tienen una relación de dispersión totalmente cuadrática.

En contraste al Grafeno, las bandas de energía del Fosforeno se encuentran virtualmente centradas justo en el punto Γ de la zona de Brioullin, mientras que en el Grafeno, las bandas de energía (conos de Dirac) se encuentran virtualmente localizadas justo en el centro de los seis puntos K .

1.6. Estructura de bandas de múltiples capas de Fosforeno

Para calcular la estructura de bandas de N capas de Fosforeno, nos basamos en el Hamiltoniano de amarre fuerte derivado de [6], de igual forma, la energía calculada a

continuación se obtuvo a partir del mismo Hamiltoniano restringiendo este resultado a los valores t_1 , t_2 y t_{il} . Tomamos en cuenta la interacción entre primeros y segundos vecinos (t_1 y t_2) para la interacción dentro de las capas individuales y únicamente interacción entre primeros vecinos (t_{il}) para la interacción entre las distintas capas de Fosforeno.

Así, la estructura de bandas $E_n(\mathbf{k})$ para N capas de Fosforeno es [6]

$$E_n(\mathbf{k}) = \pm \left| t_2 + 2t_1 e^{ik_a/2} \cos\left(\frac{k_b}{2}\right) + 2t_{il} \cos\left(\frac{n\pi}{N+1}\right) \cos(k_b) \right|, \quad (1.10)$$

con n el índice del número de capa y N el número total de capas el cual es un valor fijo. Además, recordemos que $k_a = \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}$ y $k_b = \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}$.

Para cada valor de n , obtenemos 2 bandas, la banda de conducción (+) y la banda de valencia (-). Es decir, para $n = 1$ se tienen 2 bandas, para $n = 2$ se tienen otras 2 bandas, o sea se tienen 4 bandas, dos de valencia y dos de conducción. Creciendo sucesivamente con el número de capas.

Es importante resaltar que cuando el número total de capas es $N = 1$ se recupera la expresión dada en la ecuación (1.9). La estructura de bandas es más precisa a bajas energías debido a que utilizamos pocos parámetros de enlace.

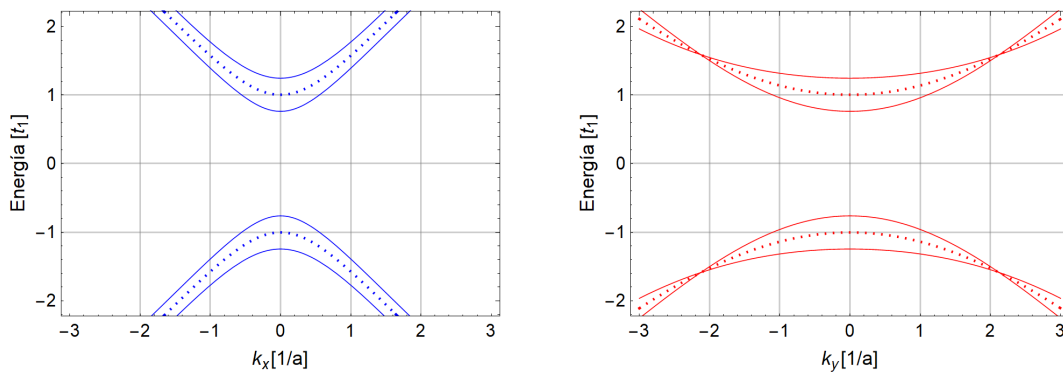


Figura 1.6: Estructura de bandas de $N = 2$ capas de Fosforeno. En ambas imágenes las líneas sólidas representan la estructura de bandas del Fosforeno de $N = 2$ capas $E_2(\mathbf{k})$, mientras que la línea punteada representa la estructura de bandas de la monocapa.

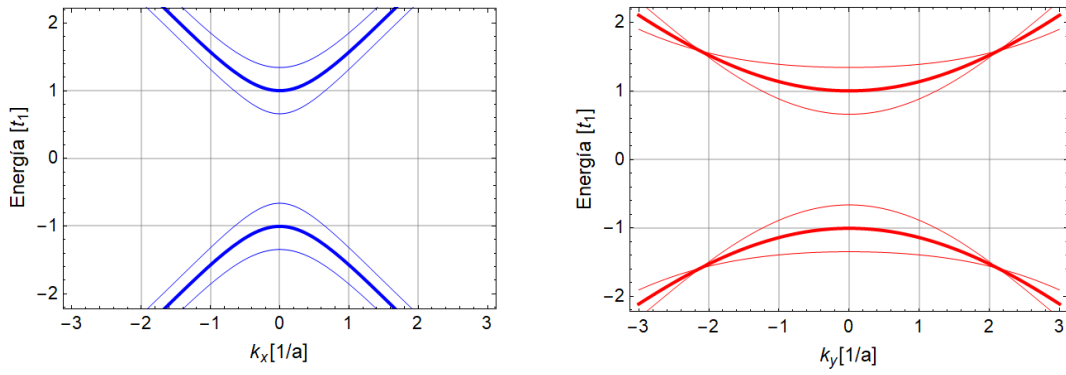


Figura 1.7: Estructura de bandas del Fosforeno de $N = 3$ capas $E_3(\mathbf{k})$. En esta Figura resaltamos con una línea sólida más intensa la estructura monocapa. Observamos que el resultado de aumentar el número de capas es la disminución del *band gap* de energía.

En el lado izquierdo de la Figura 1.7 se muestra la función $E_3(k_x)$ y del lado derecho $E_3(k_y)$. En ambas gráficas la línea más gruesa representa las bandas de la estructura monocapa. Es fácil notar que a mayor número de capas, el *band gap* comienza a disminuir.

Capítulo 2

Sobre el transporte cuántico: funciones de Green fuera de equilibrio

La siguiente sección esta basada en las referencias [8, 9].

2.1. ¿Por qué fluyen los electrones? Sistema fuera de equilibrio

Para estudiar el transporte cuántico en el Fosforeno debe existir un flujo de electrones, es decir, una corriente eléctrica a través del nanosistema. Podemos lograr un flujo de electrones si el nanosistema está conectado a una batería, de tal forma que en un extremo del nanosistema se encuentre un polo de la batería y en el extremo opuesto el otro polo. Al contacto de entrada se le llama *fuentes* y al contacto de salida *drenaje* en referencia a su significado en inglés *source* y *drain* respectivamente. De esta forma se tiene una entrada y salida de electrones al nanosistema. En esta tesis ocasionalmente se mencionará a *fuentes* como S y a *drenaje* como D indistintamente por sus nombres en inglés *Source* y *Drain*.

Para explicar el por qué los electrones fluyen a través del nanosistema, debemos considerar que cuando la energía de estos se encuentra cerca del valor llamado *potencial químico* μ , los electrones tienen la capacidad de ser conducidos [8, 9]. Cuando conectamos la batería al contacto *drenaje* esta baja los niveles de energía respecto a la *fuentes* y los potenciales químicos de cada contacto $\mu_{S/D}$ se separan por un valor qV , es decir

$$\mu_S - \mu_D = qV, \quad (2.1)$$

con q la carga del electrón y V el voltaje de *Bias* [8], dando lugar a dos diferentes funciones de Fermi

$$f_{S/D}(E) \equiv \frac{1}{1 + \exp[(E - \mu_{S/D})/k_B T]} = f(E - \mu_{S/D}). \quad (2.2)$$

Cada reservorio *fuentes* y *drenaje*, busca individualmente mantener el equilibrio, es decir el sistema busca mantener el equilibrio de su potencial químico consigo mismo. Sin embargo, el nanosistema actúa como un canal entre los reservorios, y como consecuencia la *fuentes* y el *drenaje* nunca logran el equilibrio. La *fuentes* se mantiene inyectando electrones al nanosistema, mientras que el drenaje se mantiene extrayéndolos. De esta manera, se crea un flujo de electrones, o bien una corriente eléctrica a través del nanosistema, ver Figura 2.1.

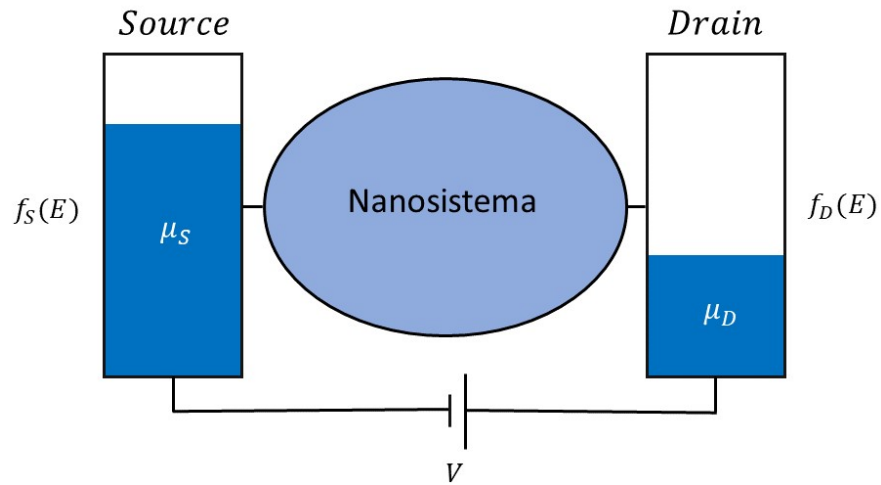


Figura 2.1: Sistema *fuentes-drenaje*. Los reservorios S y D se encuentran fuera de equilibrio. La batería mantiene una entrada y salida de electrones constante creando una corriente a través del nanosistema. La diferencia entre los potenciales químicos μ_S y μ_D es el voltaje de *Bias* qV .

2.2. Fuente y drenaje en el Fosforeno

Como ya se mencionó anteriormente, podemos encontrar dos tipos de bordes en una cinta de Fosforeno. El borde zigzag y el borde armchair. Ambos contactos S y D se pueden colocar en ambos bordes, es decir se puede colocar *fuentes* y *drenaje* en el borde zigzag, ver Figura 2.2 o bien en el borde armchair, ver Figura 2.3. Esto, con el objetivo de estudiar el comportamiento de los electrones a través de ambas direcciones del Fosforeno.

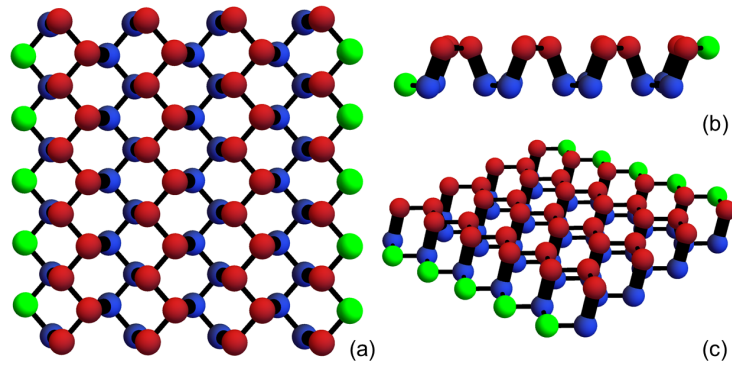


Figura 2.2: Una cinta de Fosforeno y sus diferentes vistas laterales. En (a) los átomos de color verde representan los contactos *fuentes* en la izquierda y *drenaje* a la derecha sobre el borde zigzag.

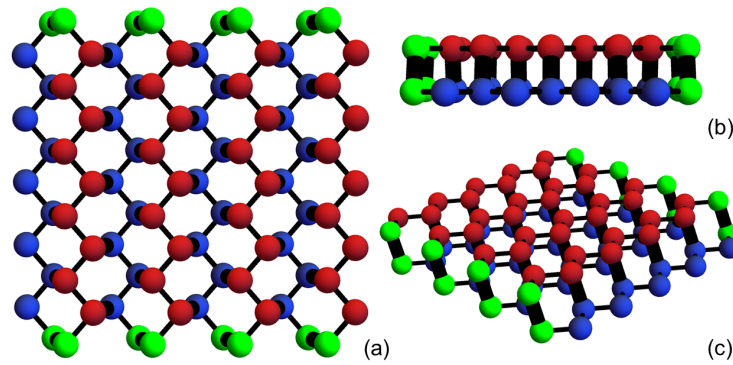


Figura 2.3: Una cinta de Fosforeno y sus diferentes vistas laterales. En (a) los átomos de color verde representan los contactos *fuentes* en la parte de abajo y *drenaje* en la parte de arriba sobre el borde armchair.

2.3. La función espectral A

Se define a la función espectral como

$$A(E) \equiv 2\pi\delta(E - H), \quad (2.3)$$

con E la energía¹ de los electrones inyectados y H el Hamiltoniano de amarre fuerte. En el espacio de configuraciones, la expansión en términos de las eigenfunciones $\psi_k(\mathbf{r})$ y las eigenenergías ϵ_k del Hamiltoniano H , la función espectral se escribe como

$$A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = 2\pi \sum_k \psi_k(\mathbf{r}) \delta(E - \epsilon_k) \psi_k^*(\mathbf{r}'), \quad (2.4)$$

donde muestra que los elementos de la diagonal de la función espectral (es decir, los elementos con $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$) dan la *densidad local* de los estados $D(\mathbf{r}, E)$. La *densidad total de los estados* se obtiene integrando en todo el espacio, o de manera más general por la traza de la función espectral

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

2.4. Funciones de Green G y G^\dagger

La distribución Delta de Dirac δ en una de sus múltiples representaciones se puede escribir 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 $\nu > 0$ es un número infinitesimalmente pequeño y ϵ_k son eigenvalores del Hamiltoniano del sistema. Usando esta representación de la distribución delta δ , se puede definir la función espectral como

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

¹Cabe recordar que la energía E y el valor de ν están multiplicados por una matriz unitaria de las mismas dimensiones del Hamiltoniano. En este caso se omitió por simplicidad.

donde introducimos la función de Green retardada G y la función de Green avanzada G^\dagger [9]. Como la densidad de estados es positiva, también podemos ver de la ecuación (2.7), que los elementos de la diagonal de la función de Green cumplen que $\text{Im}(G_{ii}) < 0$.

2.5. La función de correlación G^n

Definimos la función de correlación como

$$G^n \equiv 2\pi|\psi\rangle\langle\psi|, \quad (2.8)$$

que tiene como elementos de la matriz en el espacio de configuraciones

$$G^n(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 2\pi\psi(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r}'), \quad (2.9)$$

da la correlación del estado $|\psi\rangle$ entre las posiciones \mathbf{r} y \mathbf{r}' . En particular, los elementos de la diagonal ($\mathbf{r} = \mathbf{r}'$) dan la densidad de electrones. En equilibrio, la densidad de los electrones está determinada por la ocupación de la densidad de estados, de acuerdo a la distribución de Fermi $f(E - \mu)$ ya mencionada, ecuación (2.2). Por lo tanto, concluimos que en equilibrio la función de correlación está relacionada con la función espectral por

$$G_{\text{eq}}^n(E) = A(E)f(E - \mu). \quad (2.10)$$

2.6. Función de Green para el nanosistema

Como se mencionó anteriormente, para poder hacer un análisis del transporte de electrones, debe existir una corriente eléctrica entre los contactos. El nanosistema se conecta a los reservorios *fuentes* y *drenaje*, ver Figura 2.1.

Podemos escribir la ecuación de Schrödinger de los reservorios S y D con los corres-

pondientes Hamiltonianos $H_{S/D}$ [9],

$$(E - H_S) |\Phi_S\rangle = 0, \quad (2.11a)$$

$$(E - H_D) |\Phi_D\rangle = 0, \quad (2.11b)$$

Definimos la extracción y la inyección de electrones al nanosistema como

$$i\nu |\Phi_{S/D}\rangle = |Q_{S/D}\rangle, \quad (2.12)$$

donde el término $i\nu |\Phi_{S/D}\rangle$ lo identificamos como la extracción de electrones y a $|Q_{S/D}\rangle$ como la inyección, de tal forma que no se altere la estructura matemática de la ecuación de Schrödinger. Así, a partir de esta definición se puede reescribir de forma equivalente la ecuación de Schrödinger para S y D como

$$(E - H_S + i\nu) |\Phi_S\rangle = |Q_S\rangle, \quad (2.13a)$$

$$(E - H_D + i\nu) |\Phi_D\rangle = |Q_D\rangle. \quad (2.13b)$$

Por otro lado, si representamos el acoplamiento del nanosistema a los reservorios S y D con las matrices $\tau_{S/D}$, los estados $|\Phi_{S/D}\rangle$ se desbordan y exitan los estados del nanosistema $|\psi\rangle$, los cuales pueden regresar al los reservorios S y D como $|\chi_{S/D}\rangle$. La ecuación de Schrödinger con el sistema acoplado resulta

$$\begin{pmatrix} E - H_S + i\nu & -\tau_S^+ & 0 \\ -\tau_S & E - H & -\tau_D \\ 0 & -\tau_D^+ & E - H_D + i\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_S + \chi_S \\ \psi \\ \Phi_D + \chi_D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_S \\ 0 \\ Q_D \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Es necesario hacer notar que la inyección $|Q_{S/D}\rangle$ no se ve alterada por el acoplamiento.

Del primer y último renglón de la ecuación (2.14) junto con (2.13) podemos obtener

$$|\chi_S\rangle = G_S \tau_S^\dagger |\psi\rangle, \quad (2.15a)$$

$$|\chi_D\rangle = G_D \tau_D^\dagger |\psi\rangle, \quad (2.15b)$$

donde

$$G_S \equiv (E - H_S + i\nu)^{-1}, \quad (2.16a)$$

$$G_D \equiv (E - H_D + i\nu)^{-1}, \quad (2.16b)$$

son las *funciones de Green de los reservorios S y D*. Sustituyendo las ecuaciones (2.15a) y (2.15b) en (2.14), se tiene

$$(E - H - \Sigma_S - \Sigma_D) |\psi\rangle = |Q\rangle, \quad (2.17)$$

donde definimos las llamadas **auto-energías**

$$\Sigma_S \equiv \tau_S G_S \tau_S^\dagger, \quad (2.18a)$$

$$\Sigma_D \equiv \tau_D G_D \tau_D^\dagger, \quad (2.18b)$$

y la excitación total del sistema

$$|Q\rangle \equiv \tau_S |\Phi_S\rangle + \tau_D |\Phi_D\rangle. \quad (2.19)$$

Se define la **función de Green para el nanosistema**

$$G(E) \equiv (E - H - \Sigma_S - \Sigma_D)^{-1}, \quad (2.20)$$

donde E es la energía de los electrones inyectados. Con esta función de Green, los estados del sistema quedan definidos del siguiente modo

$$|\psi\rangle = G|Q\rangle. \quad (2.21)$$

De esta forma, la ecuación de Schrödinger del sistema acoplado ha sido transformada en una ecuación para el nanosistema, el cual está *abierto* al ambiente por las auto-energías $\Sigma_{S/D}$. Estas auto-energías representan una modificación no-hermitiana al Hamiltoniano y simplifican el problema debido a que la dimensión del Hamiltoniano es mucho menor. Sin embargo, estas auto-energías, ecuaciones (2.18a) y (2.18b), dependen de la función de Green de los contactos. Para simplificar esto se ha hecho una aproximación con un **modelo de acoplamiento** al nanosistema, en este caso, se utilizó el llamado: *modelo de banda ancha*, dado por

$$\Sigma_{S/D} = -i \sum_{\alpha \in S/D} |\alpha\rangle\langle\alpha|, \quad (2.22)$$

donde $|\alpha\rangle$ son los estados de los átomos de los contactos *fuente* y *drenaje*, que se encuentran sobre el borde de la cinta de Fosforeno.

Por último, definimos la **matriz de ensanchamiento** como

$$\Gamma \equiv i(\Sigma - \Sigma^\dagger), \quad (2.23)$$

para poder obtener la función espectral del nanosistema

$$A \equiv i(G - G^\dagger) = G(\Gamma_S + \Gamma_D)G^\dagger = A_1 + A_2. \quad (2.24)$$

2.7. Ecuaciones de corriente y transmisión del nano-sistema

Por medio de la ecuación de Schrödinger, obtenemos para la evolución temporal del proyector

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

Esta ecuación, en analogía a la ecuación de continuidad en la mecánica cuántica, nos indica la conservación de la densidad de probabilidad. Sin embargo, cuando conectamos el sistema a los reservorios, esta densidad de probabilidad no se conserva. Para el caso independiente del tiempo, el primer término de la ecuación (2.25) desaparece. Y entonces el segundo término también debe ser igual a cero. Sin embargo, el sistema está abierto hacia los contactos, lo cual implica que el segundo término puede ser distinto de cero y por ende, ser identificado como el flujo de corriente por el sistema. Utilizando la ecuación (2.8) podemos definir el operador de corriente como

$$I^{op} \equiv \frac{ie}{\hbar}[H, G^m], \quad (2.26)$$

donde e es la carga del electrón y \hbar la constante de Planck. Los elementos de la diagonal

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

nos indican la *corriente total* fluyendo al i -ésimo sitio. De esta forma, los términos individuales en esta suma pueden ser identificados como la **corriente local**² fluyendo del i -ésimo al j -ésimo elemento

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

²Las unidades de I_{ij} se miden en términos de $\frac{2e}{\hbar} \approx 78 \frac{mA}{eV}$

Integrando sobre todos los valores de energía, llegamos a la conocida **Fórmula de Landauer** [10], la corriente total a través del nanosistema

$$I_D = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE T_{DS}(E) (f(E - \mu_S) - f(E - \mu_D)), \quad (2.29)$$

donde definimos la **función de transmisión** como

$$T_{DS}(E) \equiv \text{Tr} (\Gamma_D G \Gamma_S G^\dagger). \quad (2.30)$$

La interpretación de la función de transmisión para sistemas de $1D$ es probabilística, es decir, transmisión perfecta ($T_{SD} = 1$) en un sistema de una cadena de átomos significa que la probabilidad de que un electrón sea transmitido de la *fuentes* al *drenaje* es del 100 %. Si el sistema tiene una anchura M ($2D$ o $3D$) como en el caso de una cinta de Fosforeno, el número máximo de estos canales es M . Por lo tanto, la cota superior para el valor de T_{SD} depende del número de canales que tenga el sistema.

En lo siguiente, principalmente estudiamos el transporte de electrones en el límite infinitesimalmente pequeño del voltaje de *Bias* ($\mu_S \rightarrow \mu_D = \mu$) a temperatura cero. En este caso, la función de transmisión en la energía de Fermi da directamente la conductancia cero-bias³

$$\mathcal{G} = \frac{e^2}{h} T_{DS}(E = \mu). \quad (2.31)$$

En complemento, la resistencia cero-bias, definida como el inverso de la conductancia en la energía de Fermi es

$$R = \frac{h}{e^2} \frac{1}{T_{DS}(E = \mu)}. \quad (2.32)$$

³El prefactor $\frac{e^2}{h}$ se conoce como la conductancia cuántica.

Capítulo 3

Las distintas configuraciones de *fuentes* y *drenaje*

Como se ha mencionado anteriormente, el objetivo de este estudio es el transporte de electrones en múltiples de capas de Fosforeno. Debido a esto, se tienen diferentes formas de conectar *fuentes* y *drenaje*, es decir, los contactos pueden estar colocados en todas las capas o bien, en algunas determinadas que son de interés particular. El objetivo de colocar los contactos en distintas configuraciones surge del interés de estudiar la alta anisotropía del Fosforeno. Colocando los contactos en diferentes configuraciones, se espera observar el comportamiento de los electrones en las distintas capas, además de que se desea observar las interacciones intercapa.

3.1. *Fuentes* y *drenaje* en todas las capas

En este primer caso, se tienen los contactos *fuentes* y *drenaje* colocados en todas las capas. En la Figura 3.1(a) se tienen los contactos colocados sobre el borde zigzag, mientras que en la Figura 3.1(b) se tienen los contactos colocados sobre el borde armchair. Este caso, es el de mayor importancia, ya que en el laboratorio resultaría muy desafiante

colocar algún contacto en una sola línea de átomos. Resulta más factible colocar los contactos en todas las capas del material.

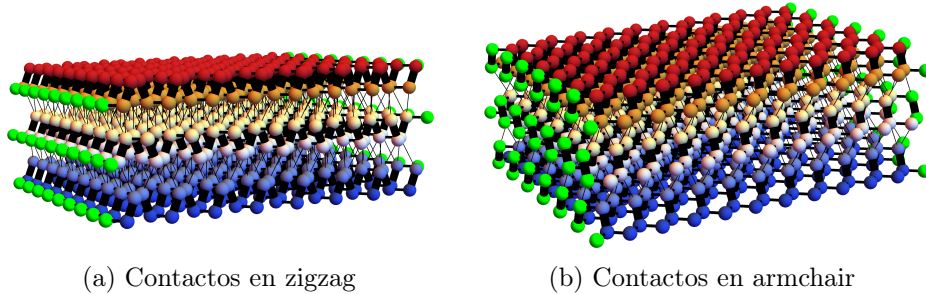


Figura 3.1: Contactos S y D en todas las capas. En (a) se tiene una cinta triple de Fosforeno con los contactos S y D colocados en todas las capas en el borde zigzag, mientras que en (b) los contactos se encuentran sobre el borde armchair.

3.2. *Fuente* en la capa inferior y *drenaje* en la capa superior

Un caso particular, de bastante interés es cuando se tienen los contactos *fuentes* en la capa más inferior y *drenaje* en la capa más superior. Esto con el objetivo de estudiar como se comporta la corriente a través de todo el sistema.

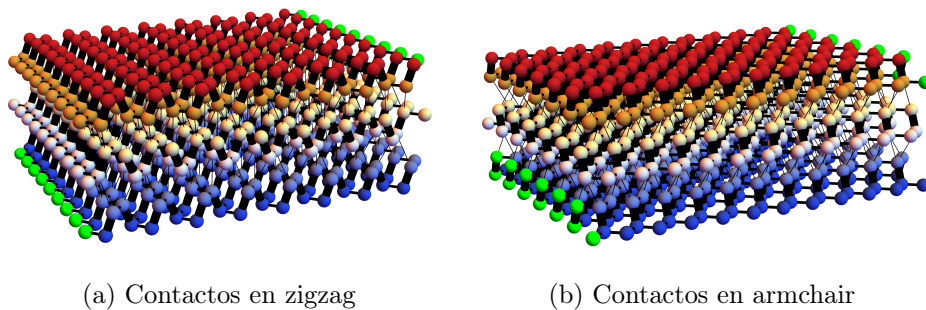


Figura 3.2: Contactos S en la capa más inferior y D en la capa más superior. En (a), se tiene una cinta triple de Fosforeno con el contacto S en la capa más inferior y el contacto D en la capa más superior del borde zigzag, mientras que en (b), los contactos se encuentran de la misma forma a diferencia que estos se localizan en el borde armchair.

3.3. *Fuente y drenaje en la capa media*

Otro caso de interés, es cuando tenemos un número de capas impares ($N = 3, 5, 7, \dots$) y colocamos los contactos *fFuente* y *drenaje* en la capa de en medio.

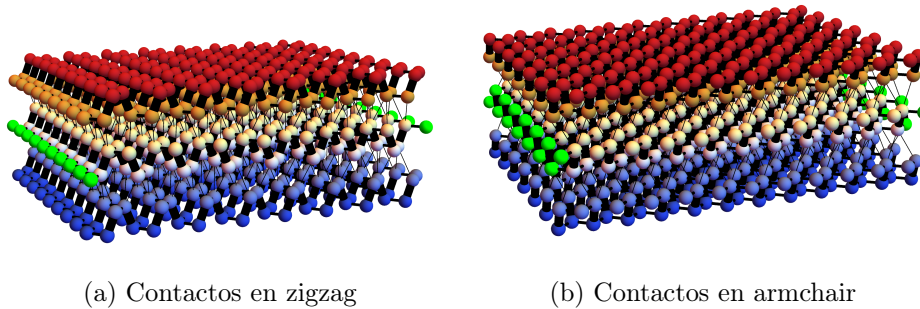


Figura 3.3: Contactos S y D en la capa de en medio. Se tienen 3 capas de Fosforeno con los contactos colocados en la capa media. En (a) los contactos se encuentran sobre el borde zigzag, mientras que en (b) se encuentran sobre el borde armchair.

3.4. *Fuente y drenaje en configuración ceiling*

Cuando tenemos un número de capas par ($N = 4, 6, 8, \dots$), construimos el caso cuando la configuración de ambos contactos se encuentra en la capa media pero en un nivel hacia arriba, como si fuera el techo (*ceiling*) de una construcción.

Como ejemplo de un sistema de número de capas par, se considera el caso particular $N = 4$. En la Figura 3.4 se observa como es que se desplaza un nivel hacia arriba los contactos de entrada y salida. Es decir, en este caso los contactos se desplazan hacia el techo de la capa media.

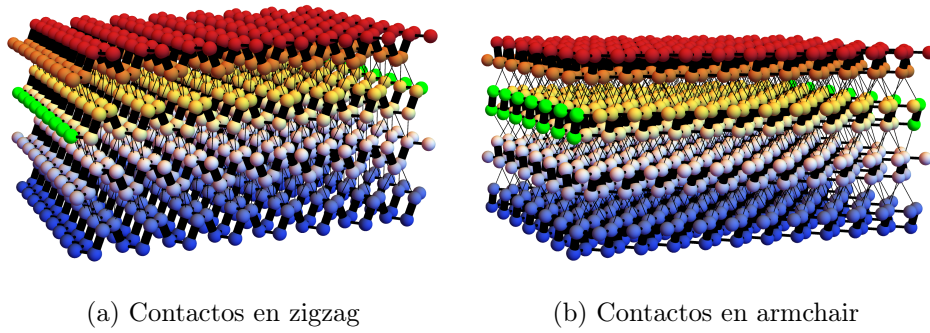


Figura 3.4: Contactos S y D en la capa de en medio desplazada un nivel hacia arriba (*ceiling*). En (a) los contactos se encuentran sobre el borde zigzag y en (b) se encuentran sobre el borde armchair.

3.5. Fuente y drenaje en configuración cruzado

Para este último caso, cuando también se tiene un número de capas par ($N = 4, 6, 8, \dots$) se colocan los contactos *fuentes* y *drenaje* de forma cruzada en las capas de en medio, es decir, *fuentes* se coloca en una capa intermedia y *drenaje* se coloca en la capa inmediata inferior; es por eso que se le nombra el caso *cruzado*, ver Figura 3.5. En este caso particular con $N = 4$, el contacto *fuentes* se encuentra en la capa $N = 3$, mientras que *drenaje* se encuentra en la capa $N = 2$.

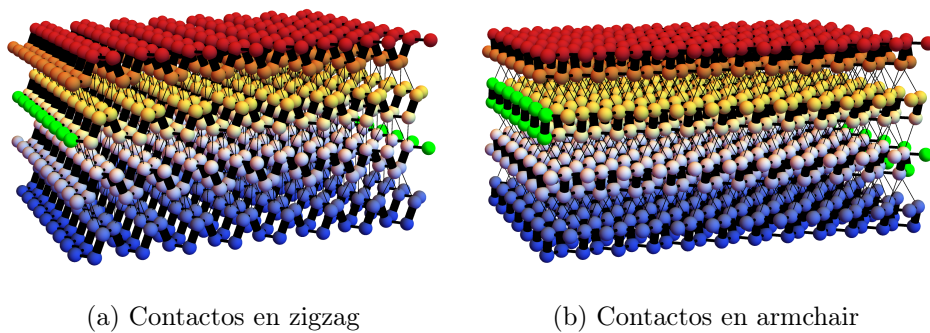


Figura 3.5: Contactos S y D en las capas de en medio superior e inferior (*cruzado*). La *fuentes* se encuentra en la capa $N = 3$, mientras que *drenaje* en la capa $N = 2$. En (a) los contactos se encuentran sobre el borde zigzag y en (b) se encuentran sobre el borde armchair.

Capítulo 4

La brecha de banda del Fosforeno

4.1. Transmisión en una capa de Fosforeno

Los cálculos presentados a continuación, se hicieron con un código propio hecho en el software Wolfram Mathematica 12.0.

Con la ecuación (2.30) podemos realizar el cálculo de la transmisión¹ para una cinta de Fosforeno. Para este caso los contactos *fuente* y *drenaje* se encuentran sobre todo el borde zigzag. Realizamos un barrido de energías desde $-1.2|t_1| \leq E \leq 1.2|t_1|$.

En la Figura 4.1, se ilustra la gráfica de transmisión de una capa de Fosforeno. En esta imagen se observa que la transmisión es nula en una determinada brecha de energía alrededor del origen. A partir de cierto valor de energía, la transmisión comienza a tomar valores distintos de cero ($T > 0$). En general, mientras más alto el valor de la energía, más grande es el valor de la transmisión. Aunque, debemos recordar que como trabajamos con un modelo de amare fuerte y pocos parámetros de enlace, los valores de $T(E)$ a bajas energías son más precisos.

Para el estudio que realizamos, nos enfocamos en el valor de la energía donde la trans-

¹El tiempo de cómputo de la transmisión de una capa de Fosforeno fue de aproximadamente 20s. Sin embargo, el tiempo escala de forma de leyes de potencia cuando se agregan múltiples capas apiladas, llegando a ser de hasta 5hr para sistemas más grandes.

misión comienza a tomar valores positivos.

Recordemos que la transmisión en un sistema como este la interpretamos como la conductancia \mathcal{G} para electrones a energía E .

Es importante notar, que la transmisión es simétrica con respecto al eje de la energía, esto es, T es igual tanto en $E > 0$ como para $E < 0$.

El resultado más importante que obtenemos de esta gráfica es que, el valor de la brecha de banda (*band gap*) del Fosforeno corresponde precisamente a la brecha de energía que hay entre el origen y el punto en donde la transmisión toma valores positivos. En la Figura 4.1, está representada la brecha de energía con una flecha horizontal de color negro. Esta brecha corresponde al *band gap* Δ de una capa de Fosforeno, que ya se ha obtenido en cálculos previos [11].

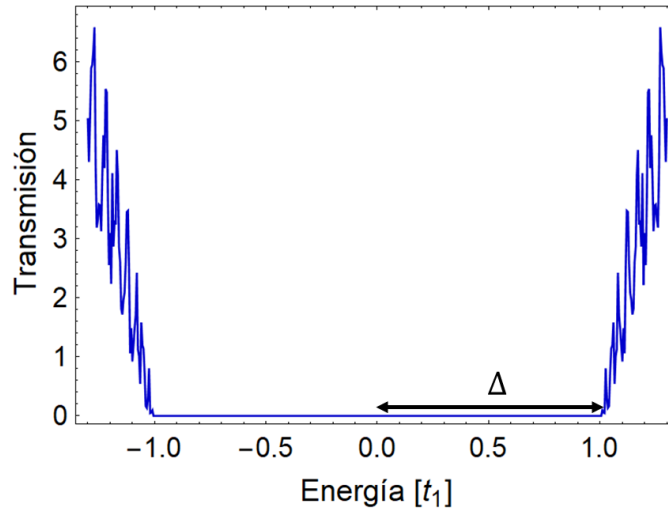


Figura 4.1: Transmisión en una capa de Fosforeno. La transmisión se interpreta como la conductancia de los electrones a energía E . Los contactos S y D se encuentran sobre todo el borde zigzag. Los valores de la transmisión son simétricos tanto para $E > 0$ como para $E < 0$. Se consideró el rango de energía $-1.2|t_1| \leq E \leq 1.2|t_1|$. La transmisión se da a partir de un cierto valor de energía representado con una flecha horizontal de color negro, el cual corresponde al *band gap* de una capa de Fosforeno $\Delta = 1.0041|t_1|$ [11].

4.2. Transmisión en múltiples capas de Fosforeno

Considerando el resultado anterior de una capa de Fosforeno, realizamos el mismo procedimiento para $N = 1, 2, 3, \dots, 14$ capas de Fosforeno apiladas. Consideramos todas las distintas configuraciones de S y D presentadas en el Capítulo 3. Sin embargo, debido al tiempo de cómputo requerido para varias capas, sólo se hizo el cálculo de valores de la transmisión para bajas energías y además sólo se calculó la transmisión para valores de $E > 0$ ya que como mencionamos anteriormente los valores para $E < 0$ son simétricos. En la Figura 4.2, se aprecian los resultados calculados para la transmisión de múltiples capas de Fosforeno con las configuraciones de los contactos mencionadas anteriormente. En la Figura 4.2(a) se tiene el caso cuando la *fuerce* y el *drenaje* se encuentran en todas las capas. Consecuentemente, en la Figura 4.2(b) se tiene el caso cuando la *fuerce* se encuentra en la capa más superior y el *drenaje* en la capa más inferior. Para cuando los contactos se encuentran en la capa media (*ceiling*), los resultados se muestran en la Figura 4.2(c), por último, en la Figura 4.2(d) se grafican los resultados cuando la *fuerce* y el *drenaje* se encuentran en la capa media de forma (*cruzada*). En todas las gráficas se omitió la etiqueta para $N > 5$ ya que las líneas son indistinguibles entre sí. Observamos, que en todos los casos sin importar la configuración de los contactos, el valor del *band gap* para muchas capas de Fosforeno disminuye hasta llegar a un valor límite, este es considerado el valor del *band gap* del Fosforeno en bulto.

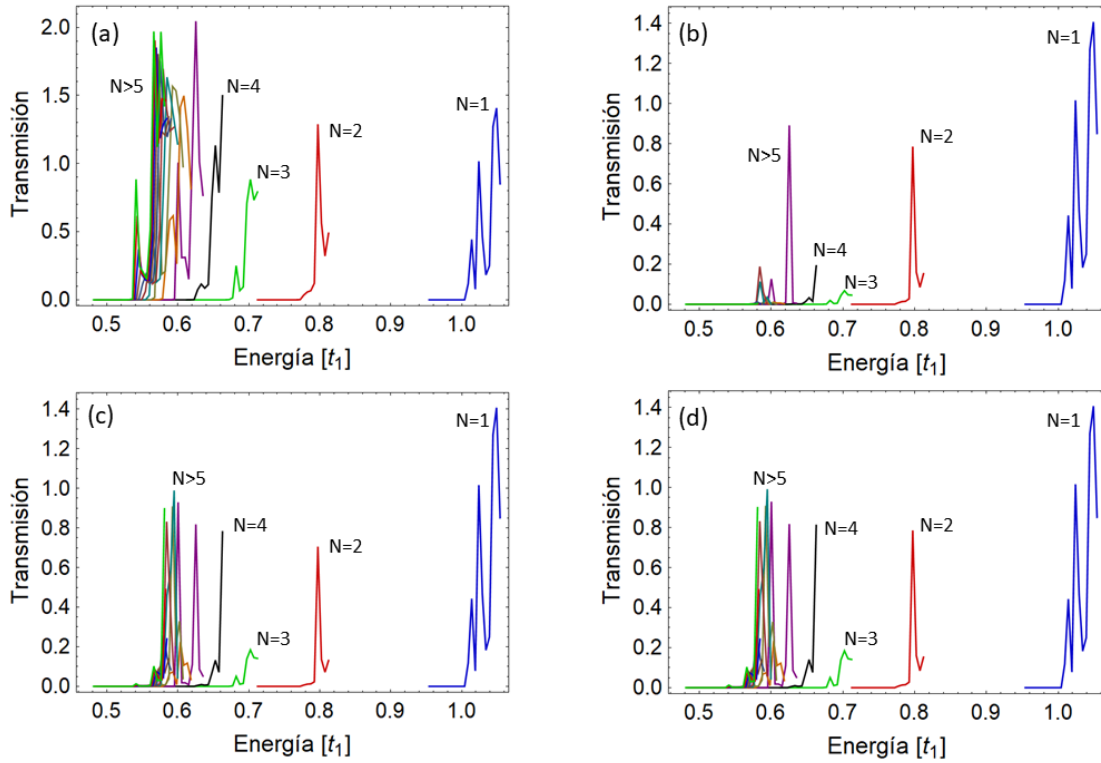


Figura 4.2: Gráficas de transmisión para distintas configuraciones de S y D . En (a) se tiene el caso donde los contactos se encuentran en todas las capas. En (b) el caso donde los contactos se encuentran en los extremos, es decir S en la capa más superior y D en la más inferior. En (c) se tiene el caso con los contactos en las capas intermedias (*cruzado*). Por último, en (d) se tiene el caso con los contactos cruzados (*ceiling*). En todos los casos se observa como la brecha de energía disminuye cuando se agregan más capas de Fosforeno. Esta disminución en la brecha de energía tiende a un límite cuando el número de capas es grande. Debido al tipo de análisis que realizamos y al tiempo de cómputo, sólo se muestra la transmisión con valores de $E > 0$.

4.3. La brecha de banda de múltiples capas de Fosforeno

El resultado más importante que hemos obtenido a partir de los datos calculados de transmisión, es que se muestra una relación entre el valor de la energía en donde la transmisión comienza a tener valores positivos ($T > 0$) y la brecha de banda (*band*

gap) del número de capas correspondiente.

Para ejemplificar esta observación, en la Figura 4.3 se muestra la gráfica de transmisión para $N = 1, 2, 3$ capas de Fosforeno apiladas. En esta gráfica, podemos ver la transmisión en función de la energía. Además se puede apreciar gráficamente como la región en donde no se tiene transmisión corresponde al *band gap* Δ_1 , Δ_2 y Δ_3 respectivamente para los casos $N = 1, 2, 3$.

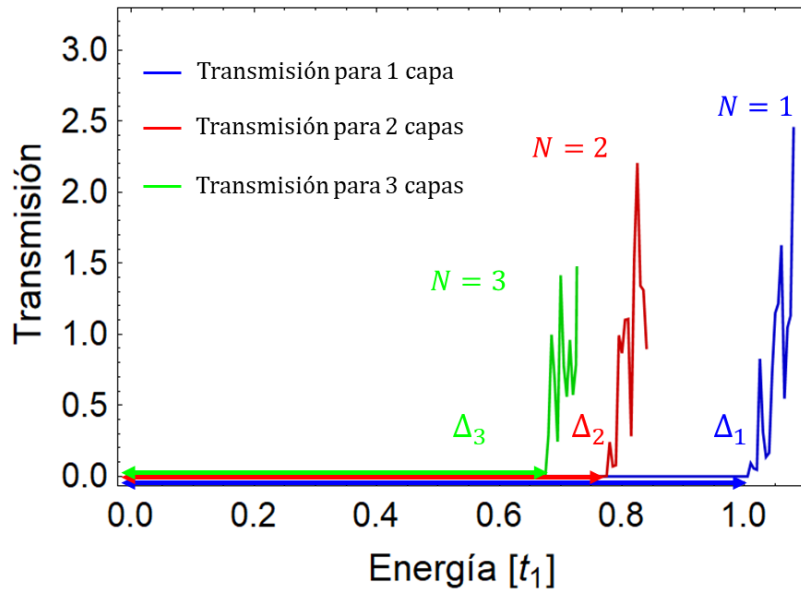


Figura 4.3: Transmisión para $N = 1, 2, 3$ capas de Fosforeno apiladas. Consideramos sólo valores de $E > 0$. Las brechas de energía correspondiente al *band gap* (Δ_1 , Δ_2 , Δ_3) están indicadas por las flechas horizontales.

A continuación, se hizo el cálculo y análisis de la transmisión para $N = 1, 2, 3, \dots, 14$ capas de Fosforeno con las distintas configuraciones de los contactos ya mencionadas en el Capítulo 3. Posteriormente, en la Figura 4.4 se ilustran los datos de la transmisión calculados por la función de transmisión en función del número de capas $N = 1, 2, 3, \dots, 14$. En el caso cuando los contactos se encuentran en todas las capas los valores de transmisión se encuentran ligeramente debajo del modelo analítico presentado, mientras que cuando los contactos *fuelle* en la capa más superior y *drenaje* en la capa más inferior los valores de transmisión comienzan a ser ligeramente superiores del modelo analítico.

Cuando se tienen los casos de contactos *ceiling* y *cruzado* el valor de la transmisión no tiene una gran diferencia ya que los sistemas son muy parecidos y en algunos casos coinciden entre sí.

Como observación, para un número de capas suficientemente grande, se llega a un límite en el *band gap* conocido como la brecha de banda del Fósforo en bulto (*bulk*) $\Delta_{bulk} \approx 0.52|t_1|$ [12].

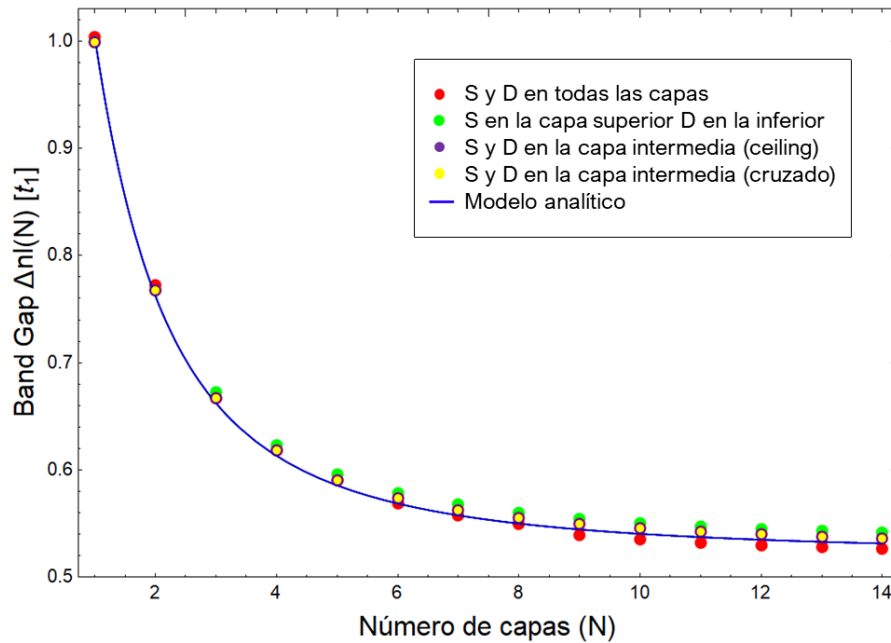


Figura 4.4: Brecha de banda de varias múltiples capas de Fosforeno. En el cuadro de referencia podemos ver a que color corresponde cada caso de configuración de los contactos. Podemos ver, que para pocas capas de Fosforeno, $N < 6$ el valor del *band gap* es muy distinto entre sí. Cuando se tienen varias capas de Fosforeno ($N > 6$) el valor del *band gap* tiende a ser muy parecido entre los distintos casos. Para $N > 14$ el valor del *band gap* tiende ser el de la brecha de banda del Fosforeno de bulto $\Delta_{bulk} \approx 0.52|t_1|$. Todos los datos obtenidos se encuentran dentro de un intervalo muy cercano del modelo analítico presentado en la ecuación (4.1).

Por otra parte, el modelo analítico es resultado de considerar los eigenvalores para el caso general de múltiples capas del Hamiltoniano presentado en [5, 6]. Representamos el modelo analítico de la brecha de banda como Δ_{nl} que depende de N el número de

capas ($nl = \text{number of layers}$):

$$\Delta nl(N) = \left| \Delta + 2 \cos \left(\frac{\pi N}{N+1} \right) t_{il} \right|. \quad (4.1)$$

En particular, para el caso monocapa ($N = 1$), se tiene que $\Delta nl(1) = \Delta = 1.0041|t_1|$ y se recupera el *band gap* ya conocido para una capa de Fosforeno [12].

Además, cuando el número de capas es muy grande ($N \rightarrow \infty$), el modelo tiende al valor del Fósforo en bulto $\Delta nl(N) \rightarrow |\Delta - 2t_{il}| \approx \Delta_{bulk}$.

Capítulo 5

Transporte electrónico en múltiples capas de Fosforeno

5.1. Transporte electrónico en una capa de Fosforeno

Para hacer un estudio cualitativo del transporte electrónico, calculamos la corriente local con la ecuación (2.28) en una cinta cuadrada de Fosforeno de aproximadamente $110|\mathbf{a}| \approx 50 \text{ nm}$ de longitud y alrededor de 6.6×10^4 átomos de Fósforo. Graficamos la densidad de corriente con electrones inyectados a una energía $E = \Delta + 0.15|t_1| = 1.1541|t_1|$, este resultado se muestra en la Figura 5.1.

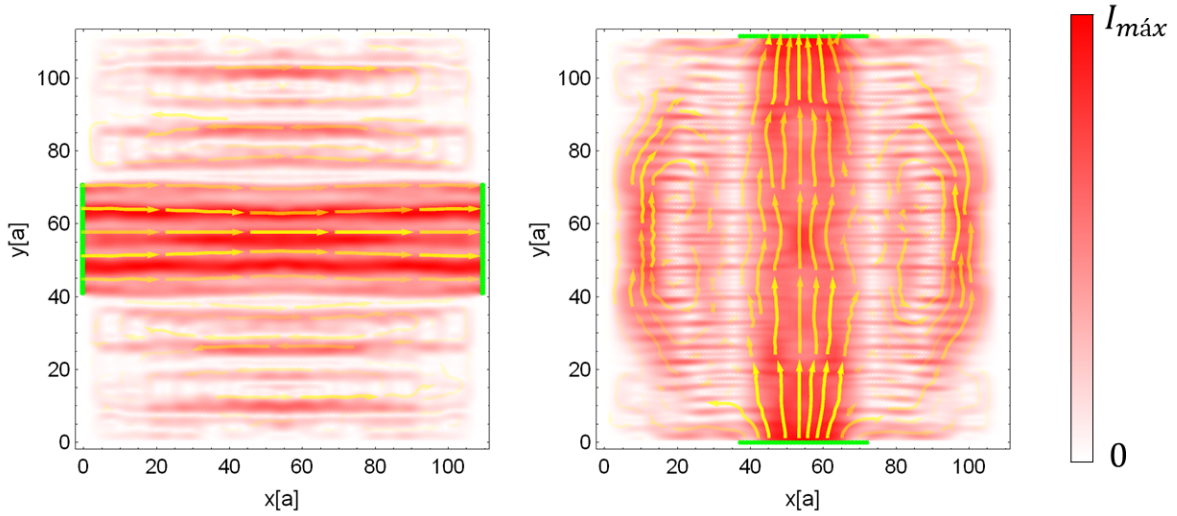


Figura 5.1: Densidad de corriente en una capa de Fosforeno. En color rojo se representa la densidad de corriente. Los electrones inyectados tienen una energía de $E = \Delta + 0.15|t_1| = 1.1541|t_1|$. En la imagen del lado izquierdo los contactos se encuentran colocados el borde zigzag y en la imagen del lado derecho la cinta tiene los contactos sobre el borde armchair.

Ambos contactos *fuentes* y *drenaje* se encuentran resaltados en ambas imágenes con una línea verde sobre el borde de la cinta, estos contactos se encuentran de tal forma que se pueda observar un haz principal dentro de la cinta. El color rojo en ambas gráficas indica la densidad de corriente calculada con la ecuación (2.28). Además, las líneas amarillas representan la resultante del campo vectorial de la corriente, las cuales llamaremos líneas de corriente.

En ambos casos, podemos observar como la densidad de corriente se concentra en su mayoría en un haz principal del ancho de los contactos y las líneas de corriente se mueven primordialmente dentro de este haz. Sin embargo, fuera de los contactos se tiene un efecto de punta en los extremos de los contactos, creando unos vórtices donde podemos ver como la corriente va en sentido contrario de donde es inyectada.

Recordemos, que los electrones que se mueven a lo largo del eje y se comportan de forma similar a electrones de Schrödinger, mientras que los que se mueven a lo largo de la dirección x se comportan como electrones de Dirac. Para más detalles del estudio

de una capa de Fosforeno se recomienda revisar [11].

5.2. Transporte con *fuerza* y *drenaje* en el borde zigzag

Para todos los resultados de la corriente presentados en esta sección, la energía de los electrones inyectados es de $E = \Delta n l(3) + 0.12|t_1| = 0.7821|t_1|$.

5.2.1. *Fuente* y *drenaje* en todas las capas

En la Figura 5.2, se tiene la gráfica de densidad de corriente para 3 capas de Fosforeno, los contactos representados con una línea verde, *fuerza* (borde izquierdo) y *drenaje* (borde derecho) sobre el borde zigzag. Al igual que para una capa, los contactos fueron adelgazados para tener una mejor perspectiva del comportamiento de la corriente. Las líneas amarillas representan el campo vectorial de la corriente.

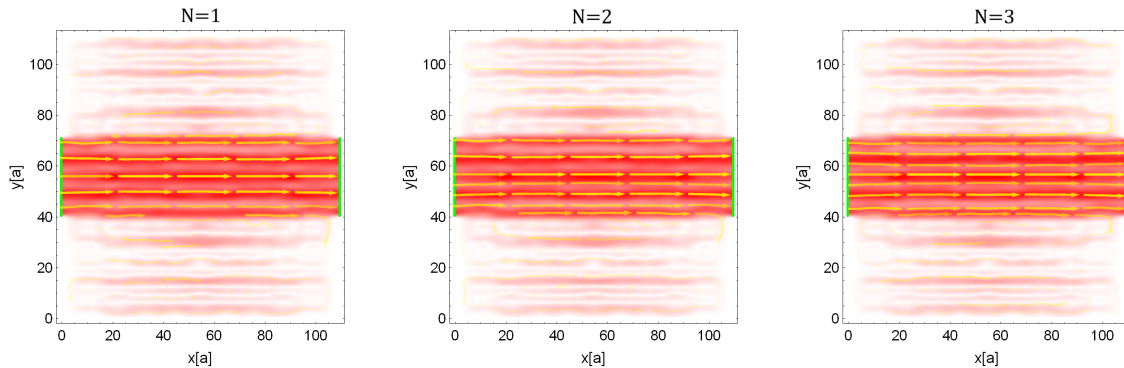


Figura 5.2: Densidad de corriente de 3 capas de Fosforeno con los contactos S y D en todas las capas. Cualitativamente las 3 capas de Fosforeno tienen el mismo comportamiento de la densidad de corriente. La corriente primordialmente se conduce en un haz principal del ancho de los contactos.

En las 3 cintas se observa un haz principal de la *fuerza* al *drenaje*, este haz tiene cualitativamente la misma forma en las 3 capas. La corriente se distribuye uniformemente

en todas las capas. Además de esto podemos notar que en los bordes del *drenaje* las líneas de corriente se desvían hacia los lados y toman la dirección contraria de donde fueron inyectados (*fuentes*), tal y como se observó en la gráfica de la monocapa aunque con menor intensidad.

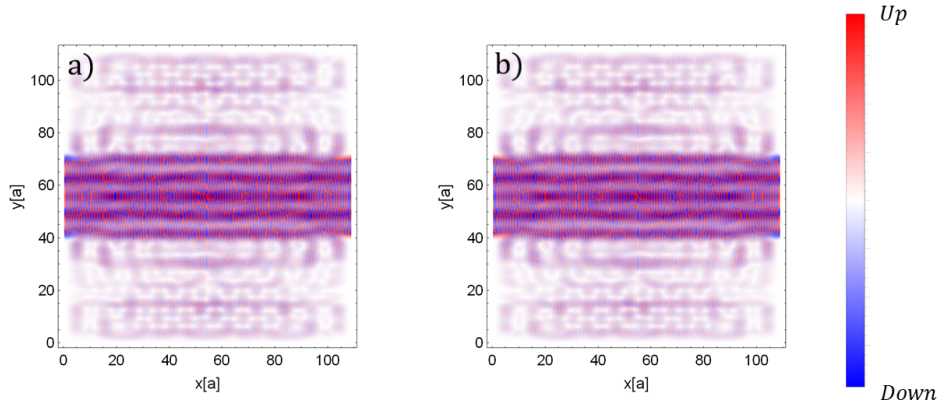


Figura 5.3: Gráfica intercapa. En estas gráficas observamos la densidad de corriente que pasa de una capa a otra. En color rojo se tienen los puntos en donde los electrones *suben* mientras que en azul los electrones que *bajan* de una capa a otra. Observamos subidas y bajadas regulares en el haz principal por donde se conduce la corriente. Esta densidad de corriente intercapa es aproximadamente un orden de magnitud menor (~ 30 veces) a la densidad de corriente sobre las capas.

En la Figura 5.3, se tienen las gráficas intercapa de la densidad de corriente. Como su nombre lo indica, estas gráficas se encuentran virtualmente entre las gráficas de densidad de corriente y representan la subida y bajada de los electrones entre las distintas capas de Fosforeno de la Figura 5.2. Es decir, la Figura 5.3(a) se encuentra virtualmente entre la capa $N = 1$ y la capa $N = 2$ de la Figura 5.2 y la Figura 5.3(b) se encuentra virtualmente entre la capa $N = 2$ y $N = 3$ de la Figura 5.2. No representan una capa física de átomos, únicamente representan la densidad de corriente de los electrones que atraviesan de una capa a otra. Los puntos en color rojo indican cuando un electrón sube (Up) de una capa a otra, y los puntos en color azul en donde los electrones bajan ($Down$). Esta densidad de corriente que fluye entre capas es aproximadamente un orden de magnitud menor al de la densidad de corriente que fluye sobre las capas

(~ 30 veces menor).

Esta figura en particular parece tener un color violeta homogéneo, sin embargo, esto sólo es un efecto visual, en realidad se tienen muchos puntos rojos y azules distribuidos homogéneamente. Este efecto se debe a que la entrada y salida de corriente, es decir, los contactos *fuentes* y *drenaje* se encuentran en todas las capas y los electrones son libres de moverse entre las 3 capas de manera uniforme. En otras palabras, las gráficas intercapa nos ayudan a ver que los electrones del sistema representado en la Figura 5.2, se mueven de forma regular y se distribuyen de manera homogénea a través de todo el sistema.

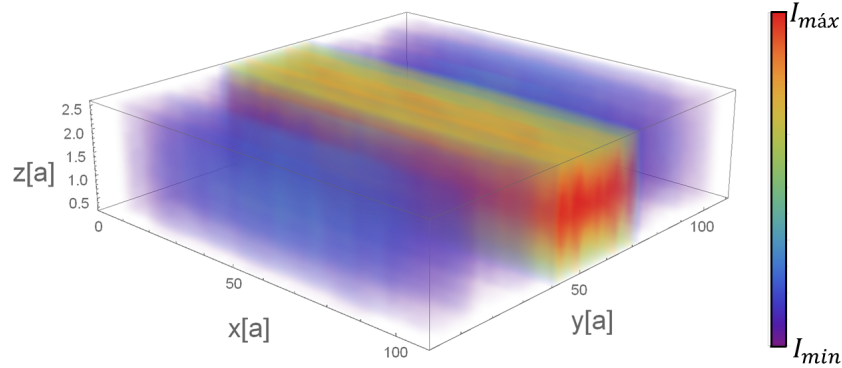


Figura 5.4: Densidad de corriente en 3D con los contactos *S* y *D* en todas las capas. El eje z se encuentran ubicadas las capas de Fosforeno. La escala de colores indica en color rojo el máximo de la densidad de corriente, mientras que el violeta indica el mínimo en la densidad de corriente.

Por otro lado, en la Figura 5.4 se muestra la gráfica de la densidad de corriente en el espacio 3D. Los colores descritos en la barra indican la escala de corriente, donde el color rojo representa el máximo I_{max} y en color violeta el mínimo I_{min} de la intensidad de corriente. En esta gráfica no están representados los contactos *fuentes* y *drenaje*. Sin embargo, se observa que existe una especie de canal donde la mayoría de los electrones son conducidos justo donde se encuentran los contactos. Se puede observar que la distribución de corriente es uniforme en todo el canal y la mayor cantidad de electrones se encuentran en el centro del flujo donde predomina el color rojo que indica una

mayor intensidad de densidad de corriente. Por otra parte, en color azul y fuera del canal principal se tiene una intensidad de corriente muy baja.

5.2.2. Fuente en la capa superior y drenaje en la capa inferior

Otro caso a considerar es cuando se tienen los contactos *fuentes* en la capa más inferior y *drenaje* en la capa más superior. En este sistema de $N = 3$ capas se tienen los contactos *fuentes* en la capa $N = 1$ y *drenaje* en la capa $N = 3$. En la Figura 5.5 es claro notar que en la capa $N = 1$ la densidad de corriente es muy intensa cerca del contacto de entrada. Posteriormente, la mayor parte de la corriente fluye a través de la capa $N = 2$. Por último, la densidad de corriente vuelve a ser más intensa en la capa $N = 3$ cerca de donde se encuentra el contacto de salida.

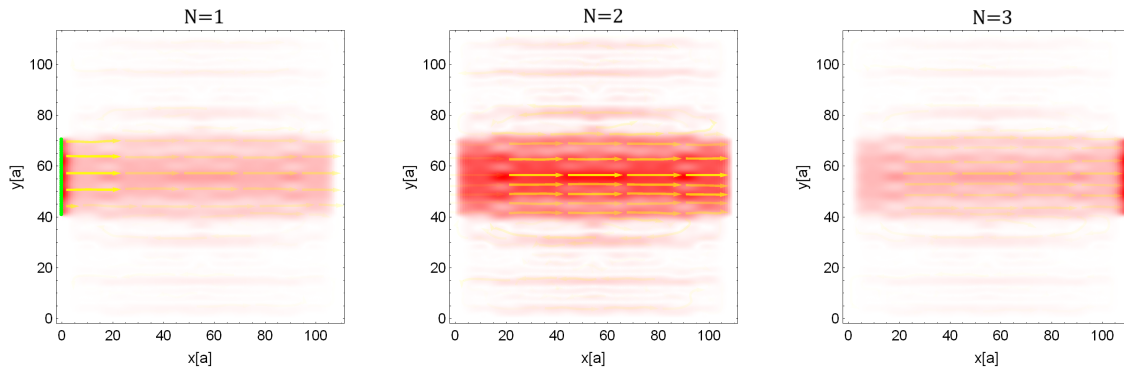


Figura 5.5: Densidad de corriente de $N = 3$ capas de Fosforeno con los contactos S en la capa más inferior y D en la más superior. En la capa $N = 1$ se observa el contacto *fuentes* y en la capa $N = 3$ se puede apreciar el contacto de salida *drenaje*, ambos representados con una línea de color verde. La corriente que sale de la *fuentes* en la capa $N = 1$ sube abruptamente a la capa $N = 2$ muy cerca del contacto de entrada, luego, la mayor parte de la corriente se mueve sobre la capa $N = 2$ y posteriormente cerca del contacto de salida vuelve a subir abruptamente de la capa $N = 2$ a $N = 3$.

En la Figura 5.6 se tiene las gráficas intercorriente, las cuales nos ayudan a confirmar lo anteriormente mencionado. De la capa $N = 1$ a $N = 2$ la densidad de corriente asciende en los puntos cercanos al contacto de entrada, ver Figura 5.6(a). Posteriormente, cerca de los puntos de salida volvemos a ver un ascenso de electrones muy cerca del contacto

de salida, ver Figura 5.6(b).

Podríamos imaginar que la densidad de corriente, por la configuración de los contactos, se distribuye de manera gradual de la capa inferior a la capa superior. Sin embargo, esto no ocurre, se tiene un ascenso abrupto cerca de los contactos y un mayor transporte en la capa intermedia ($N = 2$).

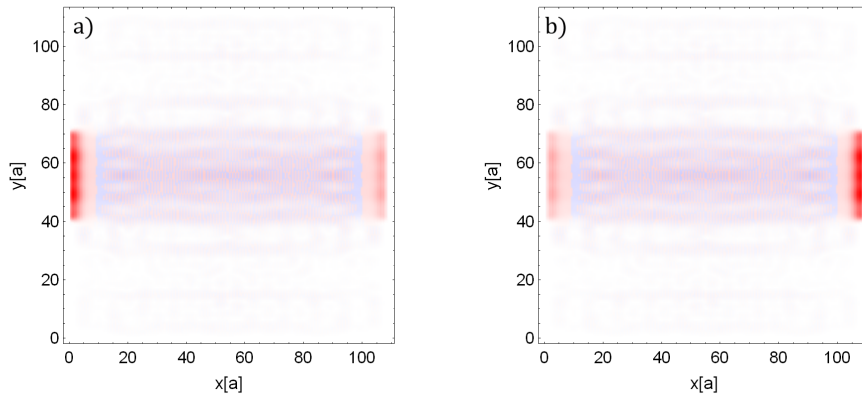


Figura 5.6: Gráfica intercapa. En (a) observamos una alta densidad de corriente cerca del contacto de entrada *fuenta*, es decir se tiene una subida abrupta de la capa $N = 1$ a $N = 2$. En (b) observamos otra subida de la corriente cerca del contacto de salida *drenaje*, donde los la corriente pasa de la capa $N = 2$ a $N = 3$.

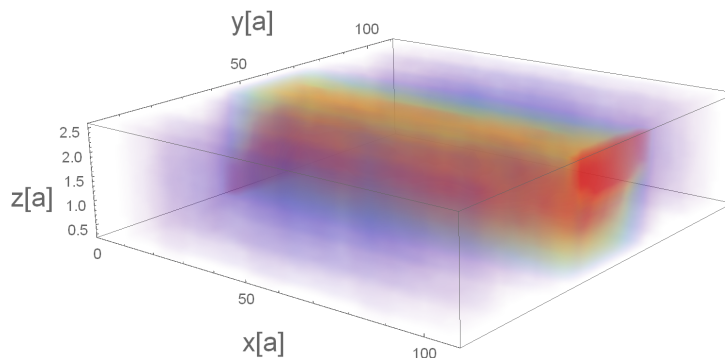


Figura 5.7: Densidad de corriente en 3D. S en la capa más inferior y D en la más superior. En la capa intermedia es donde se tiene el mayor flujo de corriente. Es claro ver que el mayor porcentaje de la corriente fluye sobre la capa intermedia. Además, observamos la subida abrupta hacia capas superiores cerca de los contactos de entrada y salida.

El la gráfica 3D, ver Figura 5.7, es más claro observar como el flujo de corriente es

forzado a subir de la capa inferior a la capa superior, y la mayor subida se electrones se ve cerca de los contactos *fuentes* y *drenaje*. Además, la mayor parte del flujo se ve en la capa media.

5.2.3. Fuente y drenaje en la capa intermedia

El último caso a considerar es cuando los contactos se encuentran en la capa intermedia. En la Figura 5.8 se puede apreciar como la mayoría de la densidad de corriente fluye a lo largo del haz principal en la capa intermedia. Sin embargo, un porcentaje de la corriente se desborda por las capas superior ($N = 3$) e inferior ($N = 1$). Se podría esperar que la densidad de corriente se distribuyera de manera uniforme hacia las capas laterales. Por el contrario, lo que observamos es que la densidad de corriente sube y baja abruptamente hacia las capas superior e inferior cerca de los contactos.

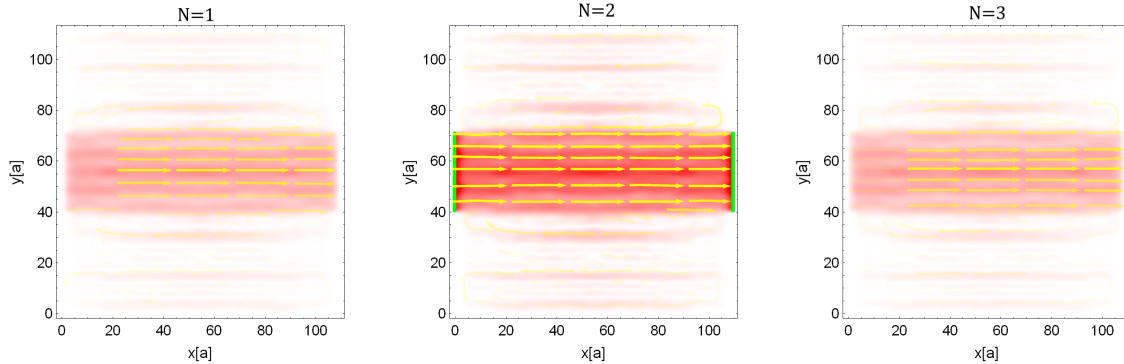


Figura 5.8: Densidad de corriente de $N = 3$ capas de Fosforeno con los contactos S y D en la capa media. En esta gráfica observamos como el mayor porcentaje de la corriente fluye por la capa $N = 2$. Sólo una pequeña parte de la densidad de corriente tiende a desbordarse por las capas externas, las cuales son las capas $N = 1$ y $N = 3$.

En la Figura 5.9 tenemos las gráficas intercapa. En estas gráficas es fácil observar el hecho de que la densidad de corriente se desborda hacia las capas superior e inferior. En la Figura 5.9(a), cerca del contacto *fuentes* vemos un descenso de electrones hacia la capa $N = 1$. Al mismo tiempo, en la Figura 5.9(b), cerca del contacto *fuentes* vemos un ascenso de electrones hacia la capa $N = 3$.

Por otro lado, en la Figura 5.9(a), cerca del contacto *drenaje* vemos un descenso de electrones hacia la capa $N = 2$, y al mismo tiempo, en la gráfica 5.9(b), cerca de contacto *drenaje*, tenemos un ascenso de electrones de la capa $N = 1$ a $N = 2$.

Una vez más, se esperaría que la densidad de corriente se distribuya de forma gradual hacia las capas superior e inferior. Sin embargo, esto no sucede. La subida y baja de electrones se da de forma abrupta cerca de los contactos de entrada y salida. Manteniendo la mayor parte del transporte en la capa intermedia.

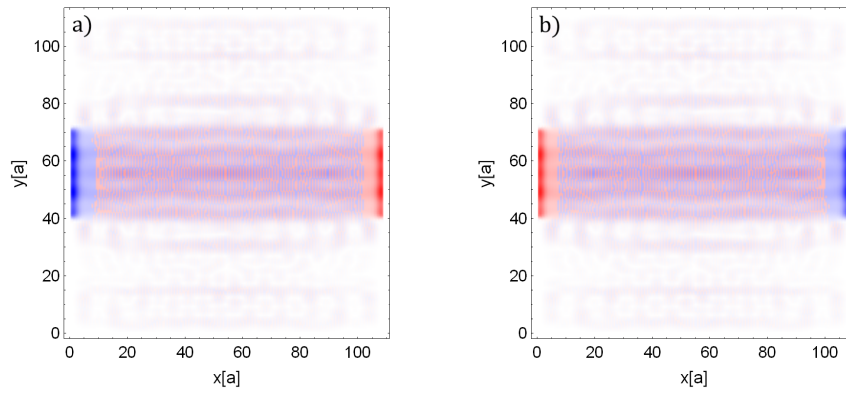


Figura 5.9: Gráfica intercapa. En (a), cerca del contacto de entrada *fuentes*, en color azul vemos como la densidad de corriente baja de la capa $N = 2$ hacia la capa $N = 1$, y en rojo, cerca del contacto de salida *drenaje* vemos que la corriente vuelve a subir hacia la capa $N = 2$. Luego en (b), observamos algo similar, sólo que los colores se encuentran invertidos. Es decir, cerca del contacto de entrada los electrones suben de $N = 2$ hacia $N = 3$, luego cerca del contacto de salida, la corriente desciende de la capa $N = 3$ a $N = 2$. La mayor parte del transporte se da sobre la capa intermedia $N = 2$.

En la Figura 5.10 se muestra la gráfica en 3D de la densidad de corriente para el caso de los contactos en la capa intermedia. En esta gráfica se puede ver claramente que el flujo principal de electrones se da en la capa media y en una escala menor se tiene transporte en las capas laterales.

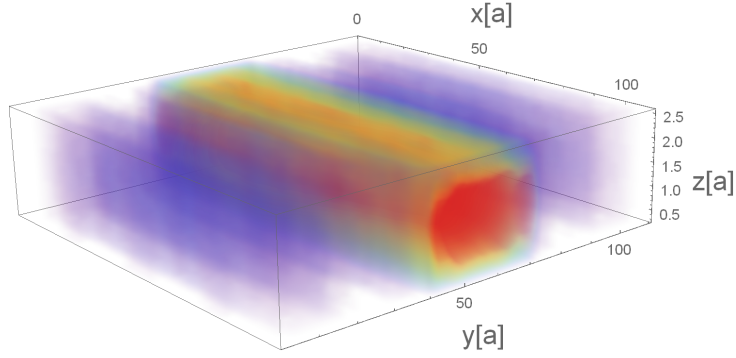


Figura 5.10: Densidad de corriente en 3D con los contactos S y D en la capa media. En esta imagen observamos que la mayor concentración de la densidad de corriente se encuentra sobre la capa media. Además, un porcentaje menor se transmite sobre las capas exteriores ($N = 1$ y $N = 3$).

5.3. Transporte con *fuentes* y *drenaje* en el borde armchair

Todos los casos considerados a continuación fueron calculados con energía a $E = \Delta nl(3) + 0.1|t_1| = 0.7621|t_1|$.

5.3.1. Fuente y drenaje en todas las capas

Ahora analizaremos los casos cuando se tienen los contactos en el borde armchair. En la Figura 5.11 se tiene la densidad de corriente para 3 capas de Fosforeno apiladas con los contactos en el borde armchair. Cualitativamente, la corriente se distribuye uniformemente en todas las capas. Para estos casos, es fácil notar que la corriente también es dirigida por un haz principal, sin embargo, existe más vorticidad fuera del canal principal. Recordemos que en esta dirección los electrones tienen la relación de dispersión como la de electrones de Schrödinger. La alta anisotropía en la estructura de bandas del Fosforeno esta presente en estas gráficas de la densidad electrónica.

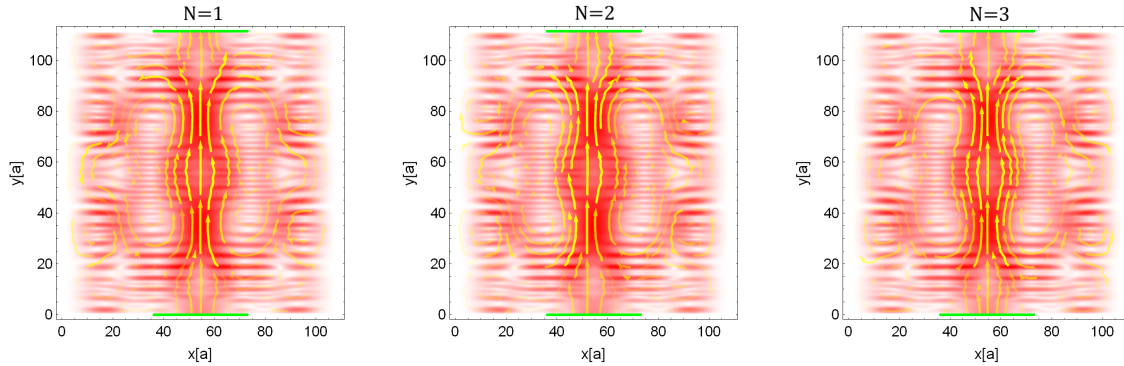


Figura 5.11: Densidad de corriente en $N = 3$ capas de Fosforeno con los contactos en todas las capas sobre el borde armchair. En este caso se observa como la densidad de corriente se distribuye de igual forma en las 3 capas. Aquí podemos observar la alta anisotropía que presenta el Fosforeno; se tiene un flujo homogéneo aunque no igual que cuando se tienen los contactos en el borde zigzag. También observamos un patrón de difracción y vórtices fuera del canal principal del flujo de corriente.

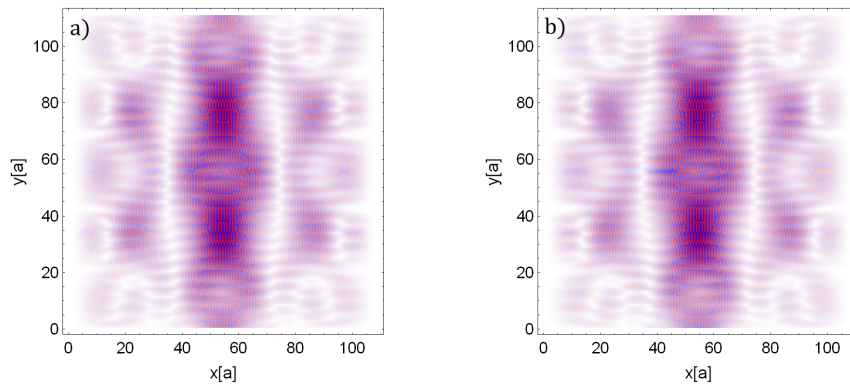


Figura 5.12: Gráficas intercapa. En estas imágenes observamos la densidad de corriente que atraviesa entre las capas. Logramos ver subidas y bajadas regulares en el canal principal. Aunque se observa un color violeta uniforme, en realidad se tienen muchos puntos rojos y azules. Es decir, se tiene una subida y bajada de corriente uniforme en todas las capas.

Asimismo, en la Figura 5.13 se tiene la gráfica de densidad electrónica en 3D. La corriente está distribuida uniformemente entre las 3 capas. Sin embargo, no se crea un canal uniforme como en los casos de los contactos en el borde zigzag ver Figuras 5.2, 5.5 y 5.8.

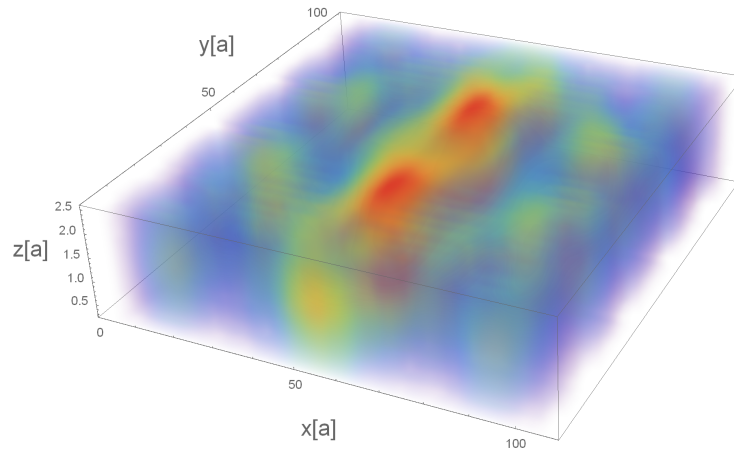


Figura 5.13: Densidad de corriente en 3D con los contactos S y D en todas las capas sobre el borde armchair. Observamos el canal principal de transmisión. Logramos ver con más claridad la anisotropía del Fosforeno, comparar con la Figura 5.4.

5.3.2. Fuente en la capa inferior y drenaje en la capa superior

De igual forma que para los casos de los contactos en el borde zigzag, los contactos sobre el borde armchair se pueden colocar en distintas configuraciones. En este caso se tienen los contactos *fuentes* en la capa más inferior y *drenaje* en la capa más superior sobre el borde armchair. De forma análoga al caso de los contactos en zigzag, la corriente es forzada a atravesar el sistema y la mayor parte de la corriente es conducida en la capa media. Como en la capa media no existe el contacto de salida *drenaje* la corriente choca con el borde de la cinta y regresa a lo largo de la dirección zigzag y a través de la dirección z . Sin embargo, la mayoría de la corriente es conducida en dirección de S a D sobre la capa media.

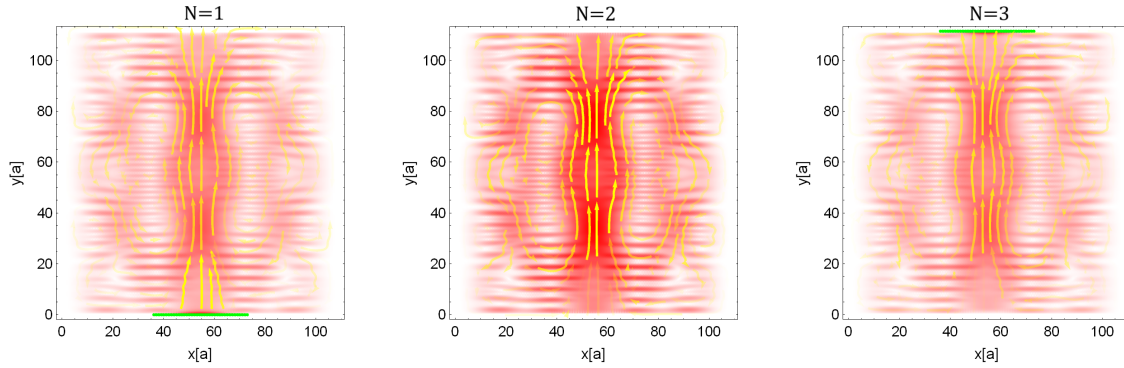


Figura 5.14: Densidad de corriente con $N = 3$. En este caso tenemos los contactos S en la capa más inferior y D en la capa más superior. Observamos que el mayor porcentaje de la corriente tiende a viajar por la capa media ($N = 2$), aunque los contactos se encuentren en las capas. Cualitativamente parecido al caso visto en la Figura 5.5, sin embargo totalmente distinto en la distribución de la densidad de corriente.

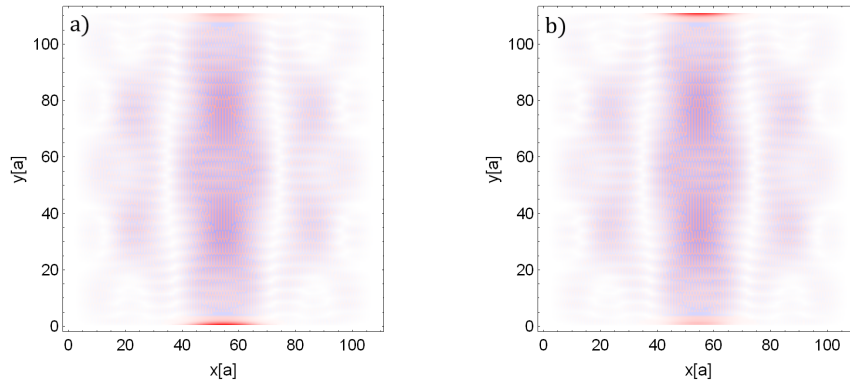


Figura 5.15: Gráficas intercapa. En (a) en la parte inferior, cerca del contacto de entrada (*fuelle*), observamos una subida de la corriente de la capa $N = 1$ a $N = 2$. Posteriormente en (b), en la parte superior, cerca del contacto de salida (*drenaje*), observamos una subida de electrones de la capa $N = 2$ hacia $N = 3$.

En la Figura 5.16, se tiene la gráfica en 3D de la densidad de corriente para el caso mencionado. Podemos observar como del lado izquierdo de la Figura 5.16 sobre el borde armchair, el contacto *fuelle* se encuentra en la capa más baja, mientras que en el lado derecho de la Figura 5.16 se encuentra el contacto *drenaje*, sobre la capa más alta del borde armchair. Podemos apreciar como el canal principal donde se conduce la corriente una vez más se encuentra en la capa media.

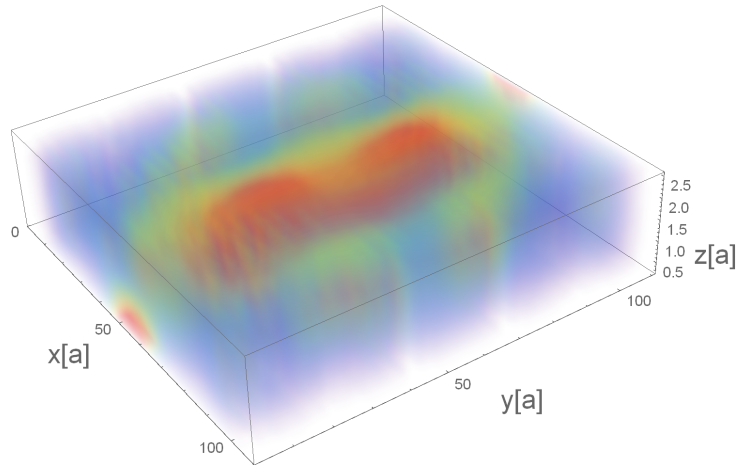


Figura 5.16: Densidad de corriente en 3D con los contactos S en la capa más inferior y D en la más superior. Observamos con más claridad que cerca del contacto de entrada (*fuentes*) y de salida (*drenaje*) se tiene una alta concentración de la densidad de corriente, sin embargo, la corriente se transmite en mayor porcentaje sobre la capa media ($N = 2$).

5.3.3. Fuente y drenaje en la capa intermedia

Por último, tenemos el caso cuando ambos contactos se encuentran en la capa media. En la Figura 5.17 se tiene la gráfica de la densidad de corriente, en ella podemos observar que la corriente utiliza principalmente el camino directo entre los dos contactos pero se extiende parcialmente a las capas de arriba ($N = 1$) y abajo ($N = 2$).

Por otra parte, las líneas de corriente tienden a formar vórtices fuera de la línea principal de conducción. La causa principal de esto es debido a reflexiones en los bordes.

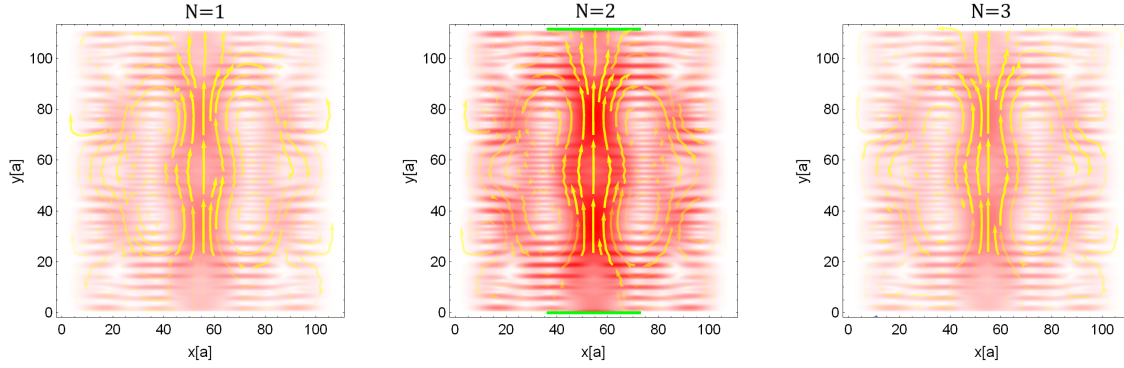


Figura 5.17: Densidad de corriente en $N = 3$ capas de Fosforeno con los contactos S y D en la capa media. Así como en la Figura 5.8, en este caso observamos como la densidad de corriente principalmente se mueve sobre la capa media ($N = 2$). Cualitativamente se tiene un comportamiento similar, sin embargo, se tiene una distribución distinta en la densidad de corriente.

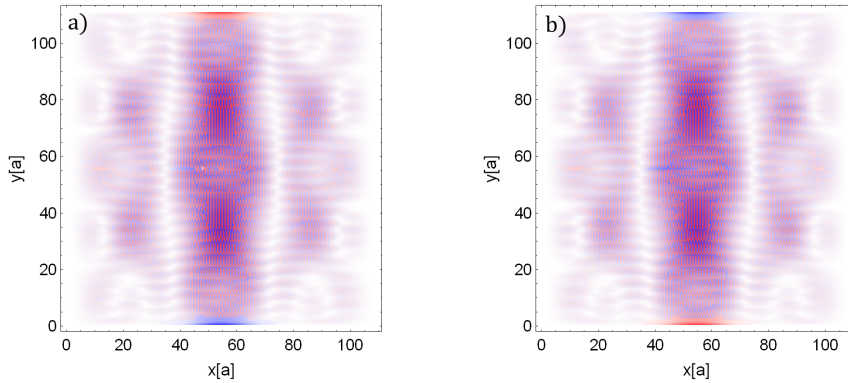


Figura 5.18: Gráfica intercapa. En (a) podemos observar una bajada (azul) y subida (rojo) de la densidad de la corriente cerca de los contactos de entrada y salida. En (b) podemos observar algo similar. Es decir, de las gráficas de densidad de corriente sabemos que el mayor porcentaje de corriente fluye por la capa media $N = 2$, pero un porcentaje mayor se transmite sobre las capas $N = 1$ y $N = 3$. En ambas imágenes la corriente sube y baja abruptamente cerca de los contactos de entrada y salida.

De igual forma, la densidad de corriente en 3D se puede ver en la Figura 5.19. En contraste con la Figura 5.10 en donde se tiene los contactos sobre el borde zigzag, se puede notar la gran diferencia en el transporte. Cuando los contactos se encuentran en el borde zigzag, se tiene un transporte más dirigido sobre el canal formado, mientras que en este caso, cuando tenemos los contactos posicionados en el borde armchair, el

transporte es más disperso.

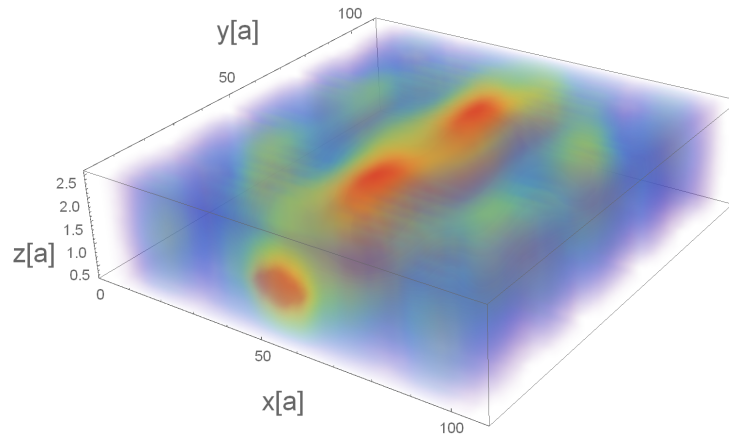


Figura 5.19: Densidad de corriente en 3D con los contactos S y D en la capa media. En esta imagen se observa con mayor claridad como se forma un canal principal en el centro de las 3 capas de Fosforeno. Sin embargo, se tiene un porcentaje menor de transmisión en las capas externas.

Capítulo 6

Efecto túnel Anti-Super-Klein en múltiples capas de Fosforeno

6.1. Unión pn en el Fosforeno

Existen distintas formas de dopar un material, la más común es cuando se agregan impurezas a un material para que este obtenga propiedades distintas [13]. Sin embargo, para dopar el Fosforeno haremos uso de un potencial electrostático generado por unas compuertas metálicas que están colocadas arriba y abajo del Fosforeno y separadas por un aislante. Dicho potencial provoca el desplazamiento de la estructura de bandas a una energía determinada, ver Figura 6.1. Para los siguientes casos, se consideró un dopaje del doble de la magnitud de la energía de los electrones inyectados, o sea $V_{dop} = 2E$, de esta forma la energía de los electrones de la banda de conducción entra en la banda de valencia y viceversa, ver Figura 6.1. Desplazando las bandas de energía podemos crear una unión pn .

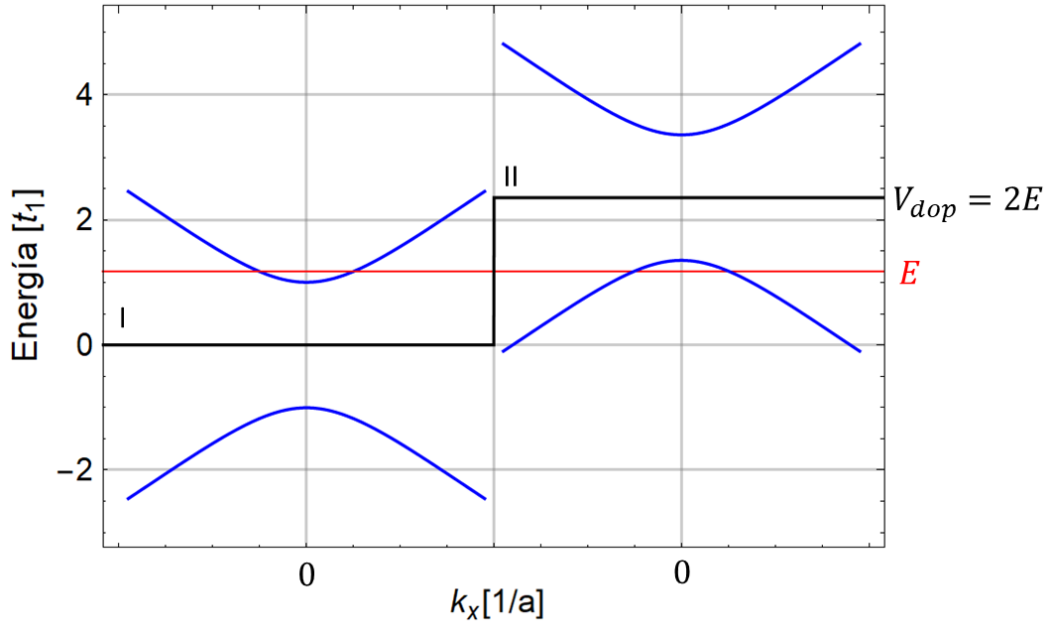


Figura 6.1: Estructura de bandas desplazada. En la región I se tiene la estructura de bandas de una capa de Fosforeno. En la región II se tiene la estructura de bandas desplazada debido a la interacción con un potencial eléctrico de magnitud $V_{dop} = 2E$. Es decir, los electrones sienten la barrera de potencial y cambian de la banda de conducción a la banda de valencia. La línea horizontal roja, indica el nivel de energía de los electrones inyectados.

En la Figura 6.2 se tienen 2 cintas de Fosforeno dopadas, la imagen de la izquierda tiene el dopaje paralelo al borde zigzag, mientras que la imagen de la derecha tiene el dopaje paralelo al borde armchair. El salto de potencial es abrupto, esto es, el salto de potencial entre la interfaz de las 2 regiones está dado por una función escalón.

Ambas cintas se encuentran divididas en 2 regiones. La región I se encuentra sombreada con color gris oscuro y representa la cinta con $V_{dop} = 0$, mientras que la región II marcada en color amarillo representa la parte de la cinta con $V_{dop} = 2E$. Los electrones que cruzan la región I se encuentran energéticamente en la banda de conducción, mientras que cuando se encuentran en la región II estos se encuentran en la banda de valencia.

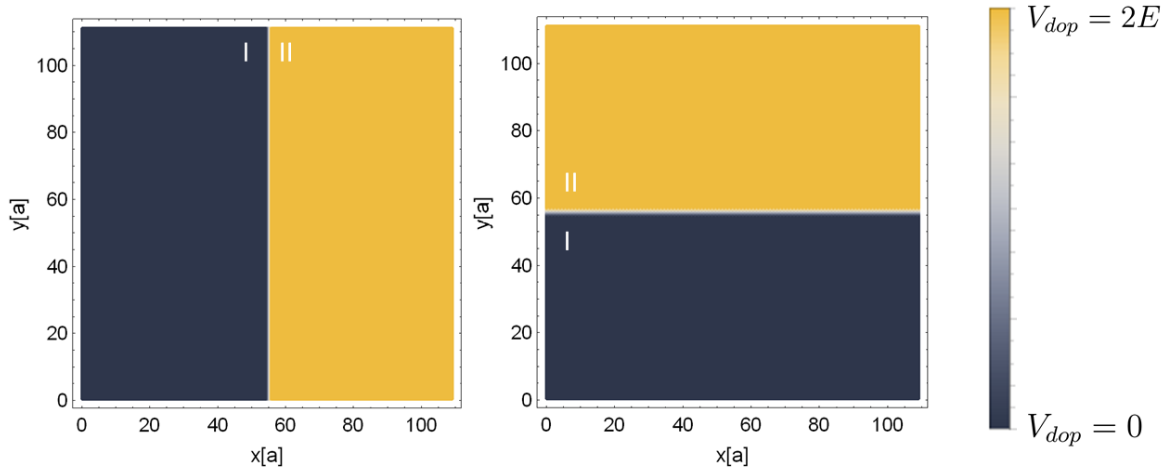


Figura 6.2: Unión *pn*. En ambas imágenes se tiene la región I en color gris oscuro, la cual representa la parte de la cinta de Fosforeno que no interactúa con ningún potencial. La región II, en color amarillo representa la región de la cinta que siente un potencial eléctrico $V_{dop} = 2E$. La imagen de la izquierda tiene el dopaje paralelo al borde zigzag, mientras que la imagen de la derecha tiene el dopaje paralelo al borde armchair.

6.2. El efecto túnel Anti-Super-Klein en una capa de Fosforeno

A partir del sistema descrito en la sección anterior, se calculó la corriente local en una cinta de Fosforeno con los contactos adelgazados sobre el borde zigzag y el borde armchair.

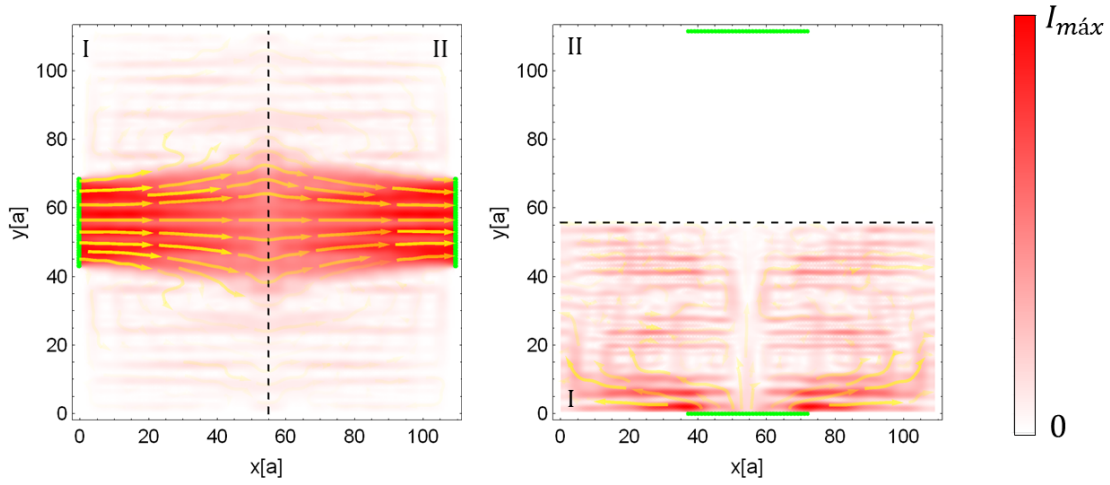


Figura 6.3: Densidad de corriente en una capa de Fosforeno con una unión pn . La imagen del lado izquierdo tiene los contactos sobre el borde zigzag y la imagen a la derecha tiene los contactos sobre el borde armchair, ambos contactos remarcados con una línea verde. La línea punteada indica la separación entre la región I y II. En la imagen del lado izquierdo, los electrones de Dirac masivos atraviesan la barrera de potencial. Mientras que, en la imagen del lado derecho los electrones de Schrödinger se reflejan totalmente cuando sienten la barrera de potencial (*efecto túnel Anti-Super-Klein*).

Los contactos S y D están remarcados con las líneas de color verde y la línea punteada indica el salto de potencial entre regiones I y II. La energía de los electrones inyectados en ambas figuras es de $E = \Delta + 0.15|t_1| = 1.1541|t_1|$.

Cuando se tienen los contactos paralelos al borde zigzag, los electrones, los cuales se comportan como electrones de Dirac, atraviesan la barrera de potencial. A primera vista, parecería que hay una transmisión total de los electrones, sin embargo, cuando se encuentran con la barrera de potencial algunos de estos electrones se reflejan, no obstante la mayor parte de los electrones son transmitidos, lo cual es el resultado que vemos en la imagen de la izquierda de la Figura 6.3. Dicho de otro modo, existe transmisión, pero esta no es transmisión total de electrones. En contraste, en un sistema similar de Grafeno, es decir una unión pn de Grafeno, los electrones atraviesan completamente la barrera de potencial, o sea, existe transmisión total. A este efecto en el Grafeno, se le conoce como *efecto de túnel Klein* [14]. No obstante, en el Fosforeno no

existe transmisión total, es por eso que no se le puede llamar *efecto de túnel Klein* a la transmisión en la dirección x del Fosforeno, solamente se puede afirmar que existe transmisión distinta de cero ($T > 0$) [11].

Por otro lado, cuando colocamos la interfaz de la unión paralela al borde armchair, ver Figura 6.3 derecha, se tiene el contacto *fuentes* en la parte inferior y el contacto *drenaje* en la parte superior, ambos marcados con una línea verde. En esta dirección, los electrones inyectados, ahora se comportan como electrones de Schrödinger. La unión *pn* se encuentra paralela a los contactos y está delimitada por la línea punteada negra. Existe una clara diferencia con el caso anterior, en este caso no existe una transmisión de la corriente a través de las 2 regiones. En este caso, se observa como la corriente es completamente reflejada cuando choca con el borde de la unión. Existe una reflexión total ($R_{total} = 1$) de los electrones en todas las direcciones sobre la interfaz de la unión *pn*. A este efecto de reflexión total se le conoce como *efecto de túnel Anti-Super-Klein* [11]. Al contrario del *efecto Klein*, el prefijo *Anti* se refiere a que en lugar de transmisión total hay una reflexión total, y el prefijo *Super* se refiere a que la reflexión se da en todas las direcciones de incidencia. La causa de este efecto no es por la ausencia de estados en la región II (ver Figura 6.1) sino por pseudo-espines opuestos en las dos regiones. La razón de este efecto es discutido a más detalle en [11].

En síntesis, la anisotropía de la estructura de bandas del Fosforeno en cada dirección da lugar a comportamientos distintos de los electrones. En la dirección x se tiene un comportamiento de los electrones como fermiones de Dirac masivos, mientras que en la dirección y se tiene un comportamiento como electrones de Schrödinger. Cuando se agrega una barrera de potencial perpendicular a la dirección de movimiento de los electrones se obtiene transmisión o bien reflexión total. El motivo de este efecto se debe a que, aunque se tienen estados en la región II, estos no son accesibles ya que se tienen pseudo-espines opuestos [11].

En lo siguiente vamos a investigar si este efecto de reflexión total persiste no sólo en una capa de Fosforeno, sino en varias capas de este material.

6.3. Transporte en uniones pn de varias capas de Fosforeno con *fuentes* y *drenajes* sobre el borde zigzag

El objetivo principal es estudiar el transporte en múltiples capas de Fosforeno, en contraste, esta ocasión a través de una unión pn . En este primer caso, se tienen 3 cintas de Fosforeno con los contactos *fuentes* y *drenajes* en todas las capas. Si comparamos con el caso base, ver Figura 6.3 izquierda, cualitativamente el comportamiento es similar, observamos que en el canal principal de transmisión las líneas de corriente chocan y atraviesan la interfaz de la unión pn . A primera impresión, la densidad de corriente atraviesa la interfaz sin pérdida alguna, sin embargo, lo que se aprecia en la Figura 6.4 es la densidad de corriente total. Existe una corriente reflejada en la interfaz la cual entra a la cinta desde *fuentes* se refleja en la interfaz de las regiones I y II y regresa al mismo contacto *fuentes*.

Fuera del canal principal, las líneas de corriente tienden a dispersarse sobre la interfaz, estas chocan y se reflejan formando pequeños vórtices.

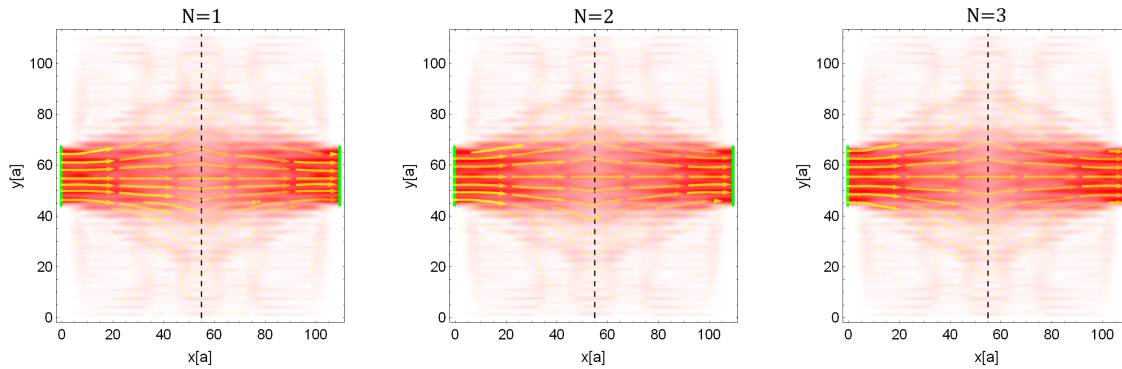


Figura 6.4: Densidad de corriente de $N = 3$ capas con unión pn . Para este caso los contactos S y D se encuentran sobre todas las capas del borde zigzag. Este caso es muy similar a donde no se tiene una barrera de potencial. Podemos observar como se tiene un transporte uniforme sobre las 3 capas. Aunque a primera vista parece que se tiene el 100% de transmisión, lo que se observa es la resultante de la corriente, en realidad se tiene un pequeño porcentaje de reflexión en la interfaz de las regiones.

En la Figura 6.5 se muestra la densidad de corriente en $3D$, donde podemos observar como fluye la corriente con mayor intensidad cerca de los contactos de entrada y salida; en el centro donde se encuentra la interfaz pn la densidad de corriente es más débil, no obstante, claramente existe transporte de S a D .

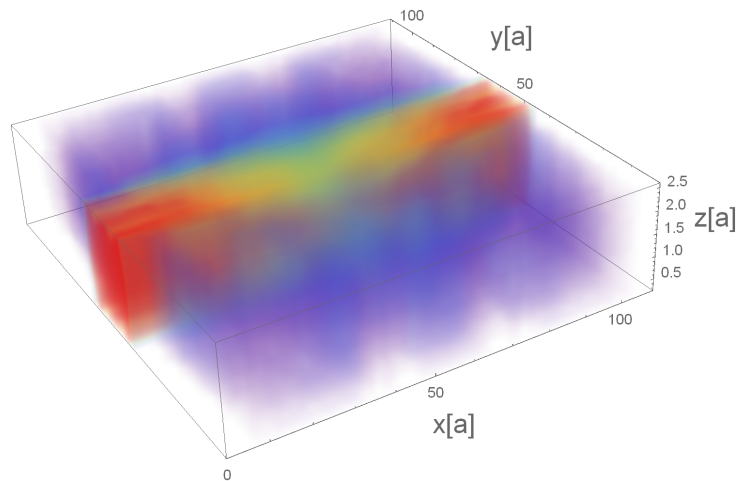


Figura 6.5: Densidad de corriente en $3D$ en unión pn con los contactos S y D en todas las capas sobre el borde zigzag. Podemos observar que la densidad de corriente se concentra cerca de los contactos *fuentes* y *drenaje*, en la interfaz de las regiones se tiene una baja concentración de la corriente. No obstante, observamos un flujo continuo y homogéneo sobre el canal principal.

El otro caso a considerar es cuando se tienen los contactos S en la capa más inferior y D en la capa más superior. En la Figura 6.6, se señala la posición de los contactos con las líneas de color verde. Las líneas de corriente son más intensas en la capa más baja debido a que la inyección de electrones se da en esta capa. Estas líneas continúan con mayor intensidad en la capa media y terminan con menor intensidad en la capa más superior. En todos los casos, las líneas de corriente en la interfaz se desbordan en dirección del borde armchair.

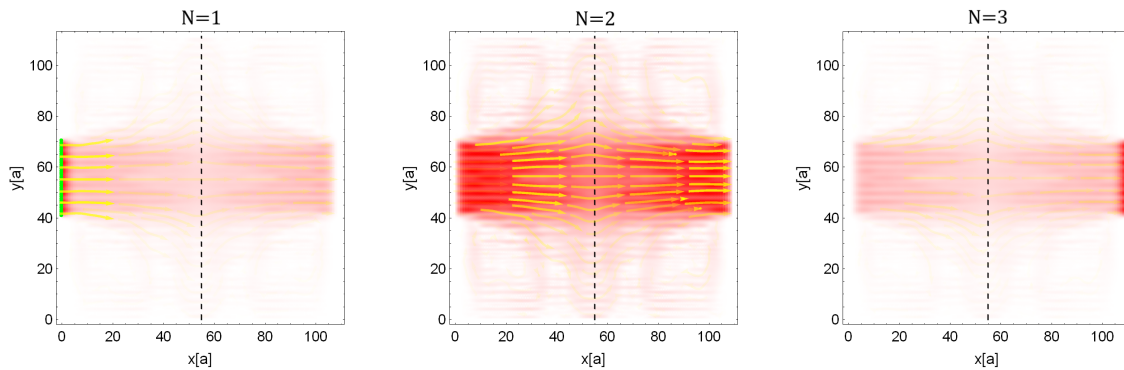


Figura 6.6: Densidad de corriente de $N = 3$ capas con unión pn . Los los contactos se encuentran en las capas externas, es decir *fuelle* en la capa más inferior y *drenaje* en la más superior del borde zigzag. En este caso observamos como la corriente sube abruptamente de la capa $N = 1$ a $N = 2$, luego la mayor parte del transporte se da sobre esa capa, posteriormente la corriente vuelve a subir abruptamente de la capa $N = 2$ a $N = 3$, cerca del contacto de salida *drenaje*. Muy parecido al caso en donde no se tiene la barrera de potencial.

Por último, mostramos el caso cuando los contactos S y D se encuentran en la capa media. En la Figura 6.7 se tiene la densidad de corriente de 3 capas con los contactos resaltados en verde. Es claro que las líneas de corriente más intensas se encuentran en la capa media donde está colocado el contacto *fuelle*. La mayor parte del transporte se da en el canal principal sobre la capa media, sin embargo, parte del transporte se dirige hacia las capas superior e inferior. En todas las capas la corriente siente la unión pn . Una parte de la corriente es reflejada y la mayor parte es transmitida y aunque las líneas de corriente son continuas de *fuelle* a *drenaje*, existe pequeño porcentaje

reflejado hacia *frente*.

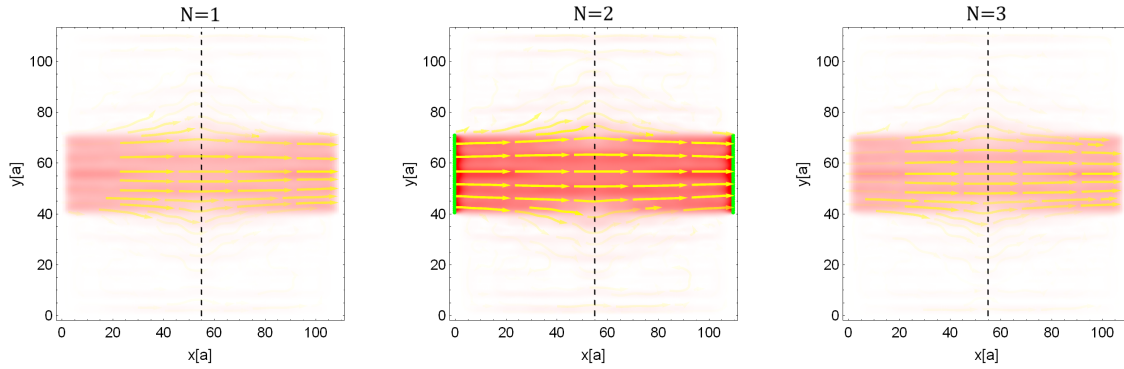


Figura 6.7: Densidad de corriente de $N = 3$ capas con unión *pn*. En este caso los contactos *S* y *D* se encuentran colocados en la capa media. Observamos que en la capa $N = 2$ se tiene una mayor densidad de la corriente. Un porcentaje muy bajo de la corriente se desborda hacia las capas externas.

En la gráfica 3D de la Figura 6.8, es más fácil distinguir como cerca de la interfaz, la densidad de corriente es más débil debido a que una parte es reflejada. A diferencia del primer caso, cuando los contactos están en todas las capas, la intensidad se concentra en la capa media en vez de distribuirse por todas las capas ver Figura 6.4.

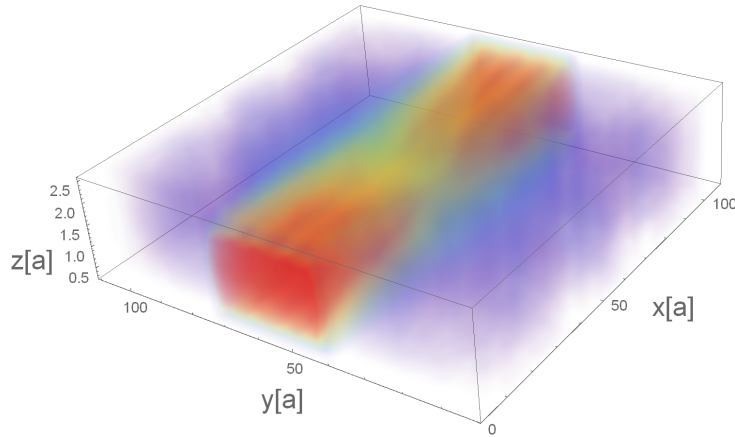


Figura 6.8: Densidad de corriente en 3D con unión *pn*. Los contactos *S* y *D* se encuentran colocados en la capa media. En esta imagen se aprecia que el mayor porcentaje de la corriente se transmite por la capa media. Sin embargo, logramos observar que en la interfaz de las regiones existe un bajo porcentaje de la densidad de corriente.

6.4. Transporte en uniones pn de varias capas de Fosforeno con *fuentes* y *drenaje* sobre el borde armchair

Al igual que la sección anterior, se tienen 3 cintas de Fosforeno apiladas. Para el primer caso se consideraron los contactos en todas las capas. Sin embargo, en esta ocasión los contactos *fuentes* y *drenaje* se encuentran sobre el borde armchair. En la Figura 6.9, se puede observar los contactos marcados con líneas de color verde. En las 3 cintas el contacto *fuentes* se encuentra en la parte inferior y el contacto *drenaje* en la parte superior. Las regiones I y II se encuentran separadas por la línea punteada de color negro.

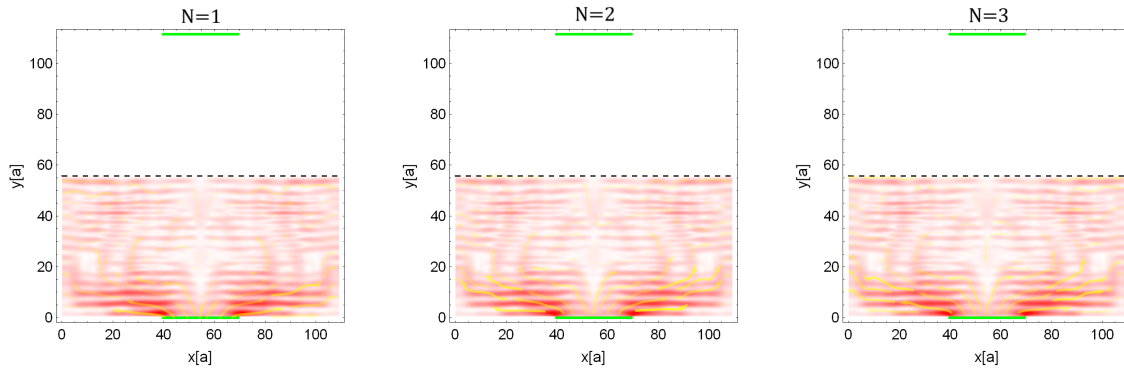


Figura 6.9: Densidad de corriente. El dopaje se encuentra paralelo al borde armchair, la interfaz se representa con la línea punteada negra. Los contactos S y D presentes en todas las capas, se ilustran en cada imagen con líneas de color verde. El efecto túnel Anti-Super-Klein esta presente en las cintas de Fosforeno apiladas. Se observa la reflexión total de los electrones en todas las direcciones.

Es claro observar que el efecto de túnel Anti-Super-Klein sigue fuertemente presente cuando se tienen varias capas de Fosforeno apiladas. La densidad de corriente, es decir los electrones que intentan fluir de S a D , sienten la barrera de potencial creada por el dopaje pn y se reflejan. Esta reflexión es total y omnidireccional. Como los contactos se encuentran en todas las capas la corriente se distribuye uniformemente por las 3 capas

de la región I.

Es importante destacar, que con el simple hecho de cambiar la posición de los contactos, los electrones tienen un comportamiento totalmente distinto. En este caso, cuando se tienen los contactos sobre el borde armchair, los electrones se comportan como electrones de Schrödinger, estos sienten la barrera de potencial y se reflejan totalmente debido a que se tienen pseudo-espines opuestos [11]. En contraste, cuando no se tiene ningún potencial, ver Figura 5.11, los electrones fluyen de S a D sin ninguna dificultad. Además de esto, para un análisis que se hará posteriormente, graficamos la densidad de corriente de la Figura 6.9 con una escala logarítmica, de tal forma que la intensidad de la densidad de corriente se ve amplificada en 3 órdenes de magnitud (10^3). En esta imagen, ver Figura 6.10, observamos el mismo sistema físico que se describe anteriormente, es decir un sistema de 3 capas de Fosforeno con los contactos en todas las capas sobre el borde armchair. Aquí, observamos que el efecto de túnel *Anti-Super-Klein* sigue fuertemente presente. Aún en la región II, aunque se tiene la corriente amplificada, no podemos observar transmisión alguna en ese orden de magnitud.

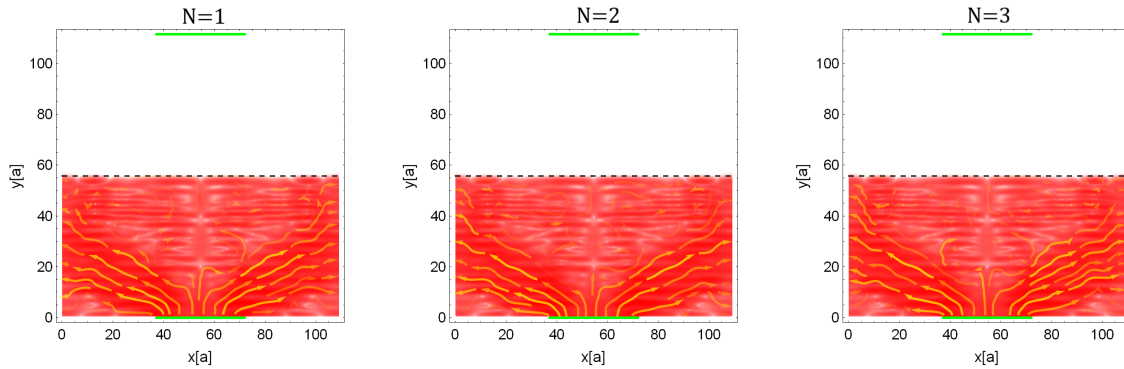


Figura 6.10: Densidad de corriente amplificada. Se replica el sistema descrito en la Figura 6.9 con la diferencia de que en esta imagen, cada punto de la densidad de corriente esta amplificado en una escala logarítmica en 3 órdenes de magnitud (10^3). Observamos que, aún con esta amplificación de la intensidad de la densidad de corriente el efecto de túnel *Anti-Super-Klein* sigue fuertemente presente, en otras palabras, seguimos observando una reflexión total en la interfaz de la unión pn .

Por otro lado, también se tiene la gráfica de densidad de corriente en 3D, ver Figura

6.11. Igualmente los contactos se encuentran en todas las capas sobre el borde armchair. En color rojo se tiene la densidad de corriente más intensa, la cual se encuentra cerca del contacto *fuentes*. La corriente se distribuye por la región I, no obstante, como ya se mencionó anteriormente, la densidad de corriente se refleja totalmente en todas direcciones cuando siente la barrera de potencial.

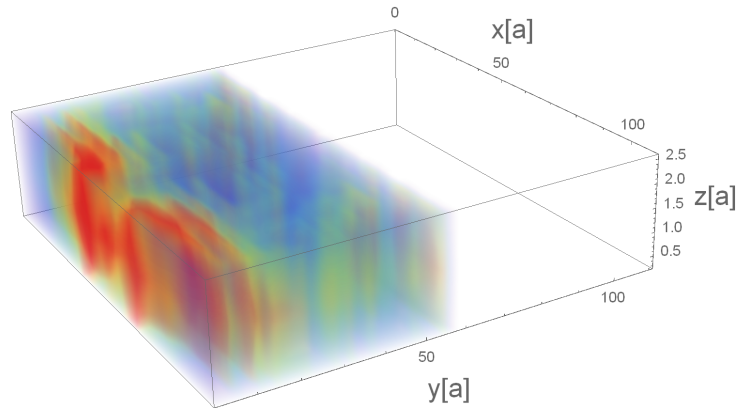


Figura 6.11: Densidad de corriente en $3D$. La densidad de corriente es más intensa cerca del contacto de entrada *fuentes*, en color rojo observamos los puntos en donde la corriente entra al nanosistema. La densidad de corriente siente la unión pn y los electrones no pueden pasar de la región I a la región II.

En las Figuras 6.12 y 6.13 se indican los casos cuando los contactos se encuentran en las otras configuraciones de interés. No obstante, el comportamiento cualitativo es muy similar al descrito anteriormente en la Figura 6.9. Dicho de otro modo, en estos casos, la densidad de corriente es reflejada totalmente en todas las direcciones de incidencia en la interfaz de la unión pn . El efecto de túnel Anti-Super-Klein está presente sin importar la posición de los contactos. La diferencia entre estos casos, radica en la distribución de la corriente entre las capas de la región I.

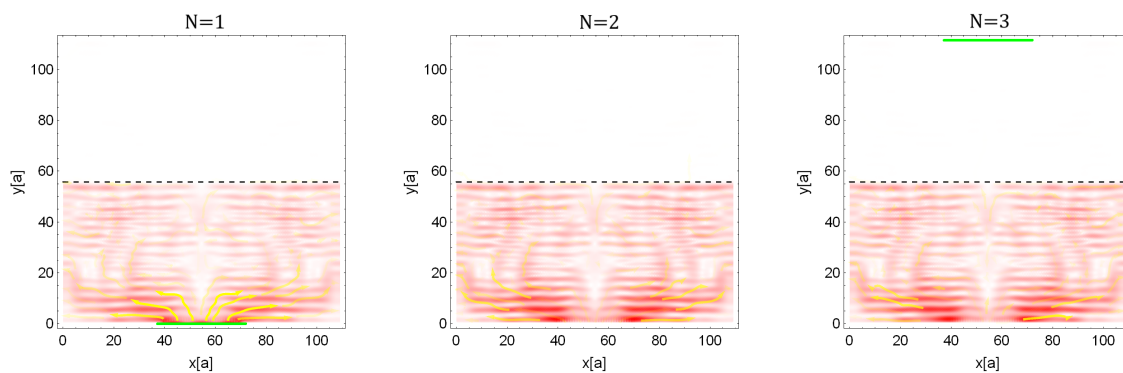


Figura 6.12: Densidad de corriente con S en la capa más inferior y D en la más superior. En la imagen de la izquierda, líneas de corriente en color amarillo son más intensas debido a que en esa capa se encuentra el contacto S marcado con una línea verde. La corriente se distribuye en las otras 2 capas superiores. La corriente es totalmente reflejada en el borde de la unión pn .

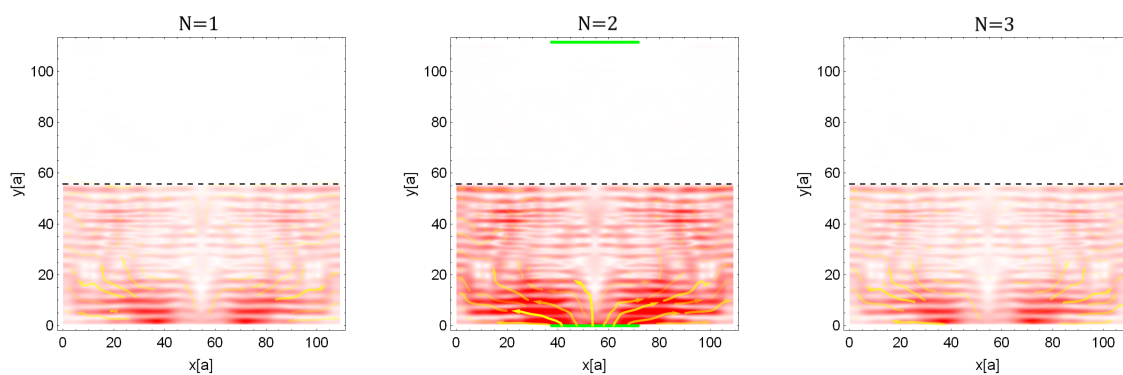


Figura 6.13: Densidad de corriente con S y D en la capa intermedia. En la imagen de en medio, líneas de corriente en color amarillo son más intensas debido a que en esa capa se encuentra el contacto S marcado con una línea verde. La corriente se distribuye en las otras 2 capas inferior y superior. La corriente es totalmente reflejada en el borde de la unión pn .

Capítulo 7

Dopaje a través de un potencial variable

7.1. Un modelo más realista: potencial variable

El estudio realizado en el capítulo anterior considera un potencial eléctrico constante para todas las capas de Fosforeno, es decir, si se tiene un sistema de 3 capas todas ellas experimentan el mismo potencial electrostático V_{dop} .

Sin embargo, esto sólo es una aproximación, ya que para que exista un campo eléctrico debe existir un gradiente de potencial eléctrico ($\mathbf{E} = -\nabla\phi$), [15]. Para simular este hecho, consideremos un sistema de varias capas de Fosforeno sumergido en un condensador de placas paralelas. Aplicando una diferencia de potencial o bien, un gradiente de potencial, el condensador genera un campo eléctrico constante. Para este potencial eléctrico se consideró un modelo lineal ϕ_{dop} :

$$\phi_{dop}(z) = |\mathbf{E}|z, \tag{7.1}$$

de tal forma que, como $\mathbf{E} = -\nabla\phi_{dop}$, entonces

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial\phi_{dop}(z)}{\partial z}\hat{\mathbf{z}}, \quad (7.2)$$

es decir,

$$\mathbf{E} = \xi\hat{\mathbf{z}}, \quad (7.3)$$

con $\xi = |\mathbf{E}| = -\frac{\partial\phi_{dop}}{\partial z}$ la magnitud del campo eléctrico dentro de las placas paralelas del condensador, la cual es constante. Además, $\hat{\mathbf{z}}$ es un vector unitario, esto es $|\hat{\mathbf{z}}| = 1$. De esta forma, cada capa de Fosforeno, siente un potencial eléctrico distinto, el cual corresponde a alguna de las líneas equipotenciales que se generan del campo eléctrico dentro del condensador.

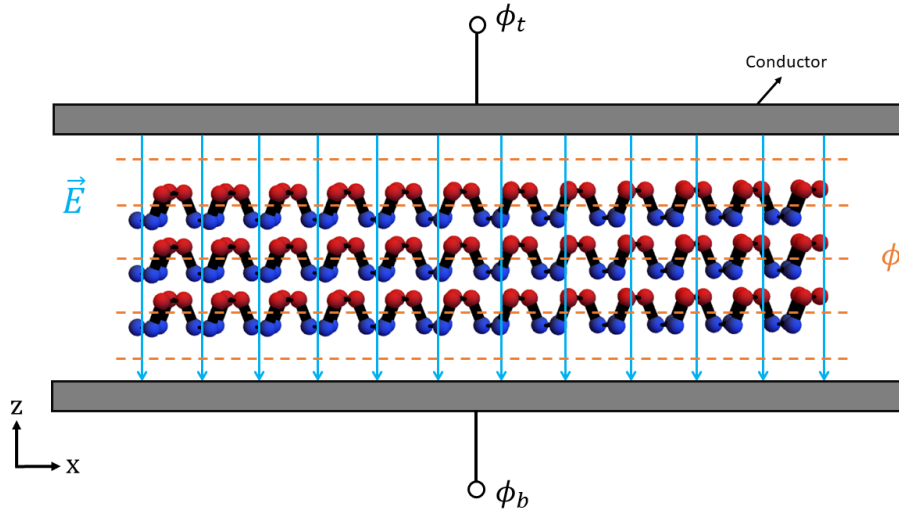


Figura 7.1: Campo eléctrico generado por un potencial variable. Las cintas de Fosforeno están sumergidas en el campo eléctrico generado por un condensador de placas paralelas. Las flechas azules representan el campo eléctrico el cual va de arriba hacia abajo. Las líneas punteadas de color naranja son las superficies equipotenciales. Cada capa de Fosforeno individual siente un potencial diferente igual a la magnitud de la superficie equipotencial.

En la Figura 7.1, se muestra un diagrama el cual representa la sección transversal del condensador de placas paralelas mencionado anteriormente, o sea la región II. Podemos

observar las líneas de campo eléctrico generadas por la diferencia de potencial, además podemos ver las líneas equipotenciales, las cuales son ortogonales a la dirección del campo eléctrico. A cada capa de Fosforeno le corresponde una línea equipotencial distinta, es decir, cada capa de Fosforeno experimenta un potencial eléctrico distinto. En este caso particular, donde se consideraron 3 capas de Fosforeno, el cero del potencial se considera en la capa de en medio.

7.2. Transporte en uniones pn de varias capas de Fosforeno con potencial variable y los contactos sobre el borde zigzag

Para el caso de potencial variable sólo consideramos los caso donde los contactos se encuentran sobre todas las capas. Además, consideramos que la energía de los electrones inyectados es de $E = \Delta nl(3) + 0.12|t_1| = 0.7821|t_1|$.

En la Figura 7.2, tenemos 3 cintas de Fosforeno, en donde la región I no percibe potencial alguno. La región II, o bien la región dopada, percibe un potencial distinto para cada capa. La capa de en medio, en este caso la capa $N = 2$, siente un potencial de $\phi_{dop} = 2E$, mientras que la capa $N = 1$ siente un potencial 15% menor que la capa $N = 2$ y la capa $N = 3$ experimenta un potencial 15% mayor al de la capa $N = 2$.

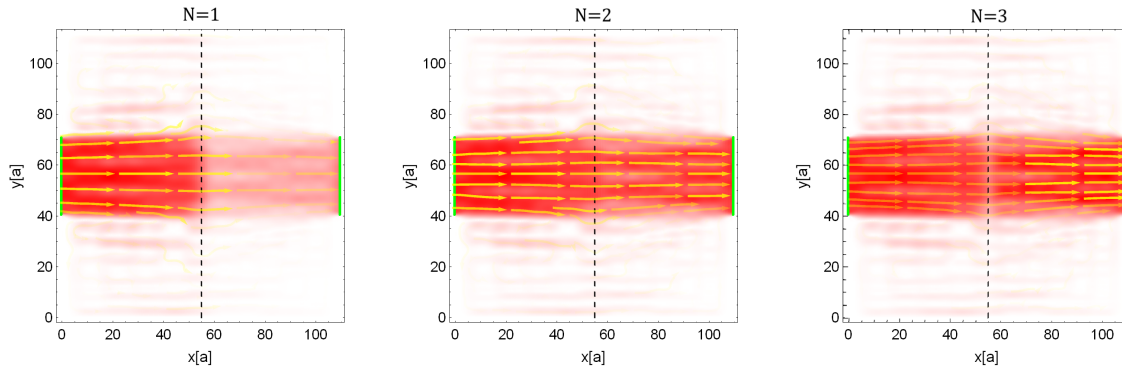


Figura 7.2: Cintas dopadas con potencial variable. En esta imagen, observamos un transporte regular en las 3 capas de la región I o sea la región que no siente un potencial. Por otra parte, en la región dopada, la región II, observamos como la densidad de corriente va de menor a mayor intensidad de la capa más inferior ($N = 1$) a la más superior ($N = 3$).

Para este caso, en la región I, observamos que la densidad y las líneas de corriente tienen un comportamiento similar entre sí, muy parecido a lo que se ve en la Figura 6.4, este resultado es de esperarse ya que en esta región no se experimenta ningún potencial eléctrico. Sin embargo, en la región II podemos ver como el comportamiento de la densidad y las líneas de corriente son distintas entre sí. En la capa $N = 1$ se tiene transporte pero a una baja intensidad, en la capa $N = 2$ la densidad de corriente aumenta de forma significativa, mientras que en la capa $N = 3$ se observa un color rojo más intenso, en referencia a que existe un máximo de densidad de corriente atravesando en esa capa. Es claro ver, que el potencial eléctrico es distinto en cada capa ya que se tiene distinta intensidad de la densidad de corriente. Aunque, como en casos anteriores la mayor parte del transporte se da en un haz principal que conecta los contactos *fuente* y *drenaje*. Existe una marcada diferencia entre el caso en donde se tiene un potencial fijo y este, ver Figura 6.4.

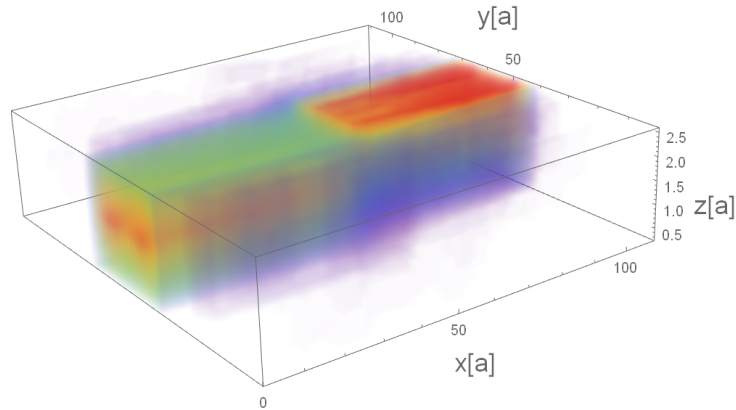


Figura 7.3: Densidad de corriente 3D. En esta imagen observamos las 2 regiones I y II. Se observa como en una región se tiene una densidad de corriente más uniforme, mientras que en otra observamos que la densidad de corriente se acumula en la capa superior.

En la gráfica 3D, ver Figura 7.3, es más fácil observar el comportamiento irregular de la densidad de corriente. En este caso especial, se agregó la vista lateral de la gráfica en 3D, ver Figura 7.4. En esta imagen se observan las 2 regiones de la cinta separadas por una línea punteada. En la región I observamos un comportamiento regular donde el transporte se concentra en el centro de la cinta, tal y como se observó en las figuras 6.4 y 6.5. En la región II, observamos como la diferencia de potencial aplicada crea un gradiente en la densidad de corriente. Observamos como en la parte inferior, que corresponde a la capa $N = 1$ se tiene un color azul, el cual indica una baja intensidad en la densidad de corriente, en la parte de en medio, en donde se encuentra la capa $N = 2$ se tienen colores amarillo y verde, los cuales indican una intensidad media, mientras que en la parte superior, donde se encuentra la capa $N = 3$ se tiene un color rojo, el cual corresponde a una alta intensidad en la densidad de corriente.

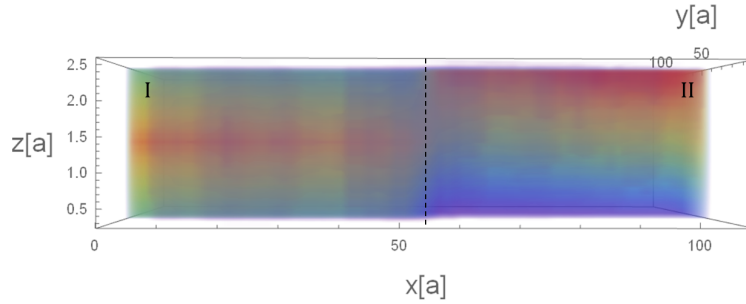


Figura 7.4: Densidad de corriente 3D vista lateral. En esta imagen tenemos la densidad de corriente en 3D para $N = 3$ capas de Fosforeno con una unión pn , en la región II se tiene la sección dopada por un potencial variable. Se puede observar que en la región I se tiene un comportamiento regular, muy similar al de la Figura 6.4, mientras que en la región II se observa un gradiente en la densidad de corriente, es decir la corriente se desplaza hacia la capa que experimenta un mayor potencial eléctrico.

En síntesis, en la región I, donde no existe un potencial eléctrico, la densidad de corriente se comporta como en el caso visto en la Figura 6.4. Mientras que, en la región II, el efecto de colocar una diferencia de potencial, resulta en la creación de un gradiente en la densidad de corriente entre las capas $N = 1$ y $N = 3$.

Podemos hacer una comparación semi-clásica con el caso en donde se tiene una carga clásica dentro de un condensador de placas paralelas. En la Figura 7.5 se puede ver el efecto que tiene un campo eléctrico generado por un par de placas paralelas cargadas. La carga que atraviesa el condensador se desvía hacia la placa cargada positivamente. En la Figura 7.4, en la región II, podemos ver un efecto similar, la mayor parte de la intensidad de corriente, denotada en color rojo, se desplaza hacia la parte superior justo como lo hacen los electrones de forma clásica dentro de un condensador de placas paralelas.

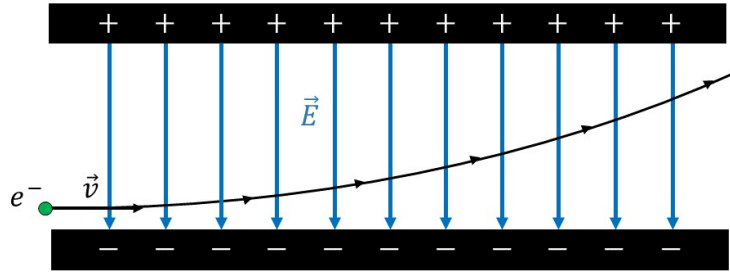


Figura 7.5: Condensador de placas paralelas clásico. Se tiene un par de placas paralelas cargadas donde se genera un campo eléctrico constante \vec{E} . Si se lanza una carga negativa (electrón e^-) a velocidad \vec{v} , esta carga se desvía hacia la placa cargada positivamente.

7.3. Transporte en uniones pn de varias capas de Fosforeno con potencial variable y los contactos sobre el borde armchair

Por otra parte, tenemos el caso cuando los contactos se encuentran colocados sobre el borde armchair y se tiene un campo eléctrico generado por un potencial variable. La energía de los electrones inyectados es de $E = \Delta nl(3) + 0.175|t_1| = 0.8371|t_1|$. De igual forma, sólo consideramos el caso en que los contactos se encuentran en todas las capas, ver Figura 7.6.

En este sistema de 3 capas de Fosforeno, a primera vista, la densidad de corriente se distribuye de forma idéntica que el caso en donde no se tiene una diferencia de potencial, ver Figura 6.9. No obstante, haciendo un análisis más profundo, realizamos una amplificación de la intensidad de la corriente en 3 órdenes de magnitud. Como resultado, cada punto rojo en la Figura 7.7 es $\sim 10^3$ veces más intenso que los puntos en la Figura 7.6. Sin embargo, ambas imágenes representan el mismo sistema de $N = 3$ capas de Fosforeno con electrones inyectados a la misma energía.

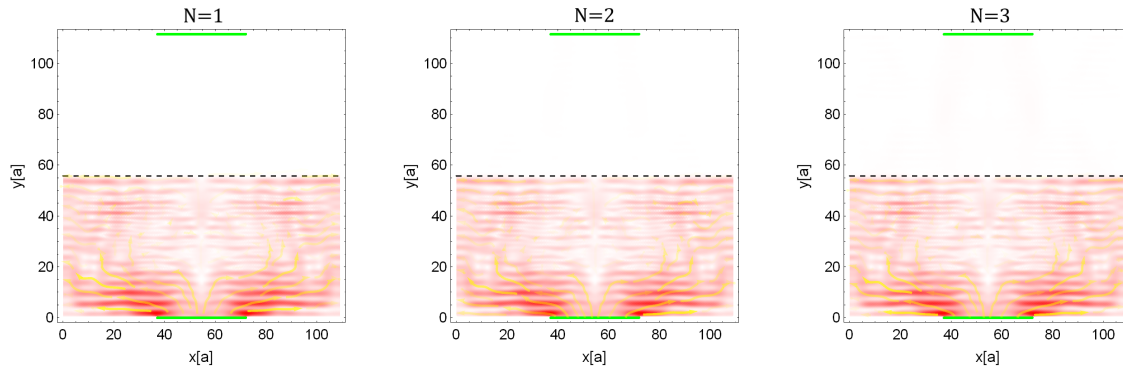


Figura 7.6: Densidad de corriente. A primera vista observamos lo que ya se había visto previamente, existe una reflexión total de la corriente en la interfaz de la unión. Sin embargo, esto no es lo que ocurre en realidad. Se tiene un porcentaje mínimo de transmisión en la región con el potencial variable.

En la Figura 7.7 se observa la densidad de corriente amplificada y las líneas de corriente. En el caso donde se tiene un potencial fijo, ver Figura 6.9, se observa el efecto de túnel Anti-Super-Klein, en otras palabras, la densidad de corriente se refleja en su totalidad en la frontera de la interfaz. En este caso, cuando tenemos un campo eléctrico generado por un potencial variable, en la región II, observamos un pequeño porcentaje de transmisión de la densidad de corriente en esta región. Esta transmisión es gradual en cada capa, en la capa $N = 1$ vemos esta transmisión pero con un tono menos intenso que en la capa $N = 3$. Esto, como resultado de que cada a capa de Fosforeno le corresponde una superficie equipotencial distinta, es decir, cada capa experimenta un valor diferente en el potencial eléctrico.

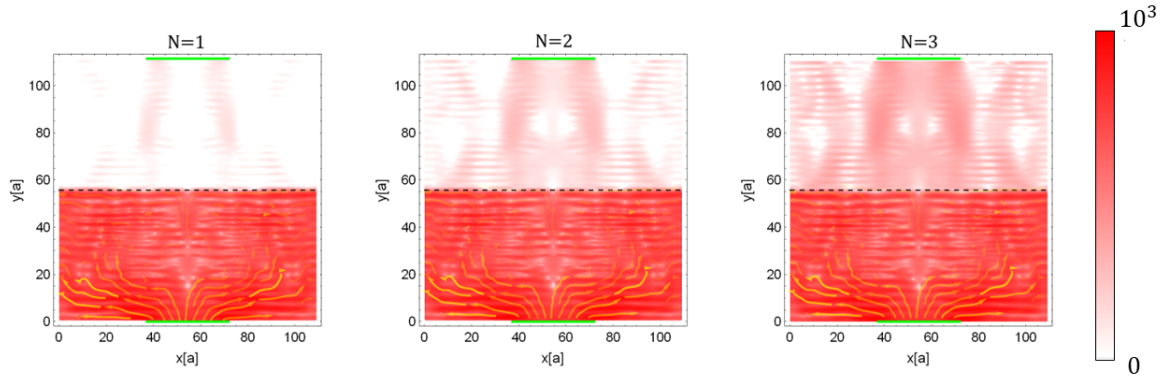


Figura 7.7: Densidad de corriente amplificada. En este caso los contactos se encuentran en todas las capas sobre el borde armchair. La intensidad de corriente se encuentra amplificada por 3 órdenes de magnitud (10^3). Se observa como en una escala logarítmica el efecto de túnel Anti-Super-Klein persiste fuertemente, sin embargo, tiene pequeñas pérdidas de aproximadamente una parte por millar. Es decir, existe un porcentaje mínimo de transmisión en la región II, pero en general el efecto de túnel Anti-Super-Klein se conserva fuertemente.

Comparando con la Figura 6.10, que es el caso en donde se tiene un potencial fijo y la densidad de corriente aumentada en escala logarítmica, observamos el efecto de túnel Anti-Super-Klein en múltiples capas, en este caso, donde se tiene un potencial variable, observamos que el efecto de reflexión total también persiste fuertemente, a excepción de que se tienen pequeñas pérdidas en la reflexión, en otras palabras, hay un pequeño porcentaje de transmisión, sin embargo este es de un orden de 10^3 veces más pequeño. En la Figura 7.8, se tiene la gráfica de la densidad de corriente en $3D$. En esta imagen es mucho más claro observar como en la región II, donde se encuentra la región dopada por una diferencia de potencial se tiene un porcentaje mínimo de transmisión.

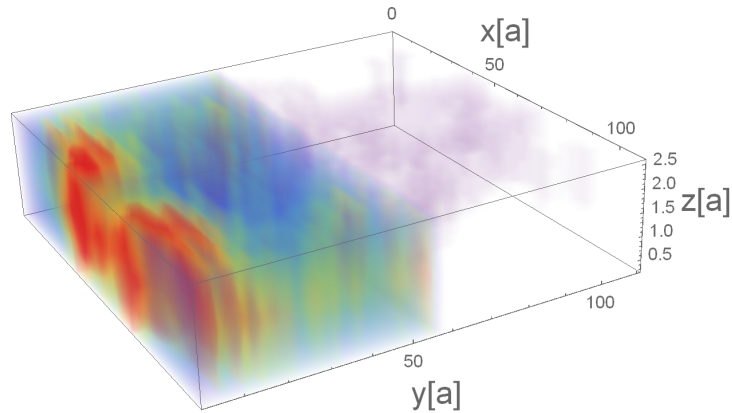


Figura 7.8: Densidad de corriente en 3D. En esta imagen observamos transmisión en la región dopada por el potencial variable (región II). Se tiene un transmisión del orden de $\sim 10^3$ veces más pequeña. En general, el efecto de túnel Anti-Super-Klein persiste fuertemente a excepción de pequeñas pérdidas en escala logarítmica.

En general, cuando se tiene un sistema de varias capas de Fosforeno con los contactos de entrada y salida sobre el borde armchair, el mayor porcentaje de electrones se refleja cuando experimenta la diferencia de potencial en la región dopada. Sin embargo, observamos un porcentaje insignificante de transmisión en la región II. Dicho de otra manera, la consecuencia de agregar una diferencia de potencial en la región dopada resulta en la pérdida de un pequeño porcentaje del efecto de túnel Anti-Super-Klein observado anteriormente. No obstante, en lo general este efecto persiste fuertemente cuando se tienen las cintas dopadas con un potencial variable.

Capítulo 8

Conclusiones

En el presente texto estudiamos el transporte electrónico de múltiples capas de Fosforeno a raíz de las interesantes propiedades electrónicas en una sola capa.

A partir del modelo de amarre fuerte propuesto, obtuvimos la estructura de bandas de $N = 1, 2, 3$ capas de Fosforeno, en las cuales observamos la alta anisotropía que presenta este material, además, logramos ver que a mayor número de capas el *band gap* del Fosforeno disminuye. En consecuencia de esta observación, con ayuda del método de las funciones de Green fuera de equilibrio calculamos la transmisión o bien conductancia eléctrica para $N = 1, 2, 3, \dots, 14$ capas de Fosforeno. Relacionamos el punto en donde se comienza a tener transmisión, o bien donde comienzan a existir estados de ocupación con el *band gap* correspondiente, en otras palabras, encontramos una relación entre el *gap* en la transmisión y el *band gap* en la estructura de bandas. Posteriormente, de todos los casos de configuraciones de los contactos vistos en el capítulo 3, graficamos el *band gap* en función del número de capas utilizado. Como resultado, replicamos el modelo obtenido por métodos analíticos dado en la ecuación 4.1. Este resultado es sobresaliente, ya que nuestro modelo únicamente considera 3 parámetros de enlace (t_1 , t_2 y t_{il}), mientras que el modelo analítico considera al menos 10 parámetros.

Por otro lado, usando el mismo marco teórico de las funciones de Green fuera de equilibrio, obtuvimos la corriente local y con eso la densidad de corriente dentro de distintos sistemas de 3 capas de Fosforeno. En general, en ausencia de un potencial eléctrico observamos un comportamiento uniforme en cada dirección de desplazamiento dentro de las capas de Fosforeno. En los casos en donde los contactos se colocan en todas las capas observamos un transporte regular sobre las cintas, la corriente viaja de la *fente* al *drenaje* en un canal principal del ancho de los contactos, aunque observamos vorticidad fuera del haz principal. En el caso en donde se tienen los contactos en la capas más inferior y en la más superior observamos una subida y bajada abrupta cerca de los contactos de entrada y salida, además la mayor parte de la corriente tiende a concentrarse en la capa media. Por último, cuando los contactos se colocan en la capa de en medio, la corriente viaja primordialmente sobre esa misma capa, aunque un porcentaje considerable también se desborda por las capas externas.

Además de esto, a partir de un potencial eléctrico, desplazamos la estructura de bandas para crear una unión *pn* en las múltiples cintas de Fosforeno. De nuevo, calculamos la corriente local a través de estos sistemas y obtuvimos como resultado que en la dirección x , cuando se tienen los contactos sobre el borde zigzag, en general existe transporte, no importando la presencia del potencial eléctrico un gran porcentaje de electrones viaja de *fente* a *drenaje* atravesando la unión *pn*. Sin embargo, cuando los electrones viajan sobre la dirección y , es decir cuando se tienen los contactos sobre el borde armchair, los electrones no logran atravesar la barrera de potencial y se reflejan completamente, sin importar la dirección de incidencia o la energía de inyección se presenta el ya conocido efecto de túnel Anti-Super-Klein, observado anteriormente en una sola capa de Fosforeno. Uno de los objetivos de estudiar el transporte en múltiples capas de Fosforeno fue justamente observar si el efecto de túnel Anti-Super-Klein se preserva. Observamos que para un potencial eléctrico constante, la reflexión de los electrones es total y omnidireccional y por lo tanto, este efecto continua presente.

En adición, se consideró un caso más realista donde se tiene un potencial eléctrico variable para generar la unión pn , observamos que en la dirección x existe transporte a través de la barrera de potencial, justo como en el caso del potencial fijo. En la región dopada observamos un efecto que no se había presentado en casos anteriores, notamos que la densidad electrónica tiende a acumularse en la parte superior del sistema, a este efecto le dimos una explicación semi-clásica comparando el sistema con el de una carga viajando a través de un campo eléctrico generado por un condensador de placas paralelas. Con esta referencia podemos explicar la causa de la acumulación de la densidad de corriente.

Por otro lado, cuando el transporte se da a lo largo de la dirección y , observamos que el efecto de túnel Anti-Super-Klein persiste fuertemente. En una escala logarítmica, logramos observar que una parte de la densidad de corriente logra atravesar la interfaz entre regiones. No obstante, el porcentaje y la intensidad de corriente que atraviesan la barrera de potencial es despreciable, alrededor de 10^3 veces más pequeño. La importancia de que cualitativamente el efecto de anti-túnel se preserva es muy importante.

En síntesis, nuestros datos de sistemas de múltiples capas de Fosforeno con pocos parámetros de enlace replican exitosamente el modelo analítico con múltiples energías de enlace. Calculamos la densidad de energía de sistemas de 3 capas de Fosforeno para compararlas con sistemas con dopajes pn producidos por un potencial fijo y un potencial variable. En ambas situaciones se tienen diferentes comportamientos dependiendo de la dirección de transporte de la corriente. Con un potencial fijo, en una dirección, la corriente atraviesa la barrera de potencial, mientras que con un potencial variable en la segunda región tiende a acumularse en la región superior. En la otra dirección, con un potencial fijo, la corriente se refleja totalmente, y con un potencial variable el efecto persiste cualitativamente ya que la corriente que atraviesa la unión pn es alrededor de 3 órdenes de magnitud menor que la corriente inyectada.

Apéndice A

Hamiltoniano *mono-layer*

El presente apéndice da los pasos intermedios que se tienen para llegar de las ecuaciones (1.1) y (1.4) al Hamiltoniano *mono-layer* en forma matricial, ecuación (1.5).

El Hamiltoniano de amarre fuerte mencionado en el texto se escribe de la siguiente forma

$$H = \sum_{\langle n,m \rangle} (t_{nm} |n^A\rangle \langle m^B| + \text{H.c.}), \quad (\text{A.1})$$

donde $\langle n, m \rangle$ indica que la suma sólo se hace sobre primeros y segundos vecinos, H.c. es el término Hermitiano conjugado. Añadimos aquí los súper índices A y B para distinguir las dos diferentes sub-redes donde se encuentran los átomos de Fósforo, ver Figura A.1.

Consideramos el ansatz de onda plana, descrito en la ecuación (1.4) como

$$|\psi\rangle = \sum_j (a|j^A\rangle + b|j^B\rangle) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j}, \quad (\text{A.2})$$

con el cual podemos resolver la ecuación de Schrödinger

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (\text{A.3})$$

para poder determinar las variables a , b y E .

Calculamos los elementos de matriz con un estado auxiliar fijo y arbitrario $\langle l^A |$, entonces

$$\langle l^A | H | \psi \rangle = \sum_{\langle n, m \rangle} \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} t_{nm} \underbrace{\langle l^A | n^A \rangle}_{\delta_{ln}} \underbrace{\langle m^B | j^B \rangle}_{\delta_{mj}} b, \quad (\text{A.4})$$

donde todos los otros elementos del producto son nulos ya que

$$\langle i^\alpha | j^\beta \rangle = \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta}, \quad (\text{A.5})$$

entonces

$$\langle l^A | H | \psi \rangle = \sum_{\langle l, m \rangle} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m} t_{lm} b, \quad (\text{A.6})$$

y como el estado $\langle l^A |$ es fijo, la suma sólo corre por el índice m .

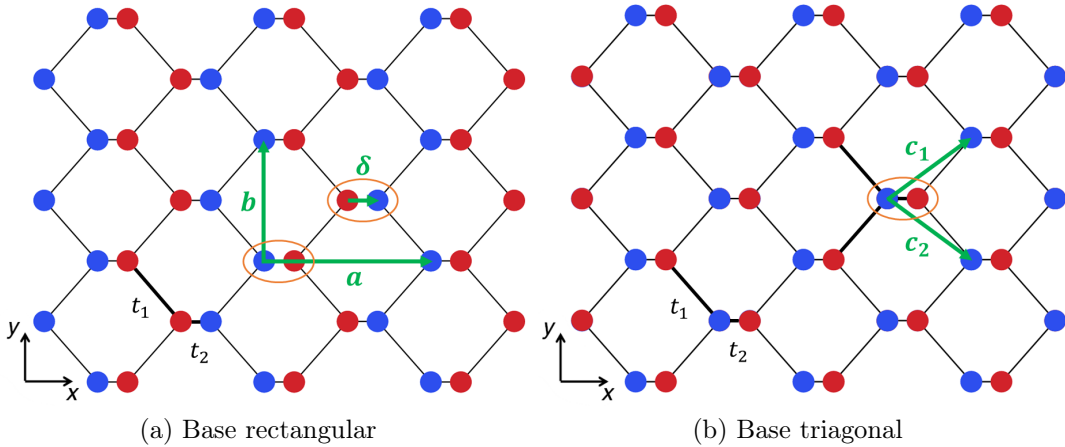


Figura A.1: Base rectangular y triagonal. En (a) en color verde se tienen los vectores \mathbf{a} y \mathbf{b} de la base rectangular con la que se puede reproducir el *buckling* en el Fosforeno. Mientras que en (b), se tienen los vectores de la base triagonal \mathbf{c}_1 y \mathbf{c}_2 los cuales, aunque no reproducen el *buckling* si reproducen la estructura electrónica del Fosforeno. En (b) también podemos ver que el átomo central de la red triagonal tiene interacción de primeros y segundos vecinos con 3 átomos cercanos con parámetros de interacción t_1 y t_2 . En la figura (a) el color de los átomos nos ayuda a ver el *buckling* en el Fosforeno, mientras que en (b) el color de los átomos nos ayuda a diferenciar las dos sub-redes A y B .

Por otro lado, podemos reescribir los vectores base \mathbf{a} y \mathbf{b} en términos de una base triagonal, denotada por los vectores \mathbf{c}_1 y \mathbf{c}_2 . Entonces definimos

$$\mathbf{c}_1 = \frac{1}{2}(\mathbf{a} + \mathbf{b}) \quad , \quad \mathbf{c}_2 = \frac{1}{2}(\mathbf{a} - \mathbf{b}). \quad (\text{A.7})$$

Como únicamente consideramos la interacción entre primeros y segundos vecinos, el átomo con estado fijo $\langle l^A |$ interactúa con tres átomos vecinos, dos de ellos mediante el parámetro t_1 y el otro mediante t_2 , el alcance de esta interacción está representada de la siguiente forma:

$$\mathbf{a}_1 = \mathbf{c}_1 - \boldsymbol{\delta} \quad , \quad \mathbf{a}_2 = \mathbf{c}_2 - \boldsymbol{\delta} \quad , \quad \mathbf{a}_3 = -\boldsymbol{\delta}, \quad (\text{A.8})$$

donde \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 son la interacción para t_1 y \mathbf{a}_3 la interacción para t_2 . Con esto, podemos reescribir la ecuación (A.6) como

$$\begin{aligned} \langle l^A | H | \psi \rangle &= (t_1 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + t_1 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} + t_2 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3}) b e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l} \\ &= b e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}} (t_2 + t_1 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}/2} \underbrace{(e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}/2} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}/2})}_{2 \cos(k_b/2)}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l} \\ &= b \underbrace{e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}} (t_2 + 2t_1 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}/2} \cos(k_b/2))}_{g(\mathbf{k})} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l} \\ &= b g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

con $k_a = \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}$, $k_b = \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}$ y $k_\delta = \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}$. Además, del otro lado de la ecuación, se tiene que

$$\langle l^A | E | \psi \rangle = E \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} a \underbrace{\langle l^A | j^A \rangle}_{\delta_{lj}} = E e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l} a. \quad (\text{A.10})$$

Análogamente, para un estado fijo $\langle l^B |$, tenemos que

$$\langle l^B | H | \psi \rangle = a g^*(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l} \quad (\text{A.11})$$

y

$$\langle l^B | E | \psi \rangle = E e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l} b. \quad (\text{A.12})$$

Así, con estas 2 ecuaciones (una para el estado $\langle l^A |$ y otra para el estado $\langle l^B |$) obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} g^*(\mathbf{k})a &= Eb \\ g(\mathbf{k})b &= Ea \end{aligned} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & g^*(\mathbf{k}) \\ g(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}, \quad (\text{A.13})$$

finalmente, de esta forma identificamos a

$$H^{ml}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & g^*(\mathbf{k}) \\ g(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.14})$$

como la ecuación (1.5).

Bibliografía

- [1] G. E. Moore, “Cramming more components onto integrated circuits,” *Electronics*, vol. 38, p. 114, Apr. 1965.
- [2] Wikipedia, “Transistor count — Wikipedia, the free encyclopedia.” <http://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Transistor%20count&oldid=1039392690>, 2022. [Online; visitado 17-Junio-2022].
- [3] A. Brown and S. Rundqvist, “Refinement of the crystal structure of black phosphorus,” *Acta Crystallographica*, vol. 19, pp. 684–685, Oct. 1965.
- [4] A. N. Rudenko and M. I. Katsnelson, “Quasiparticle band structure and tight-binding model for single- and bilayer black phosphorus,” *Physical Review B*, vol. 89, p. 201408, May 2014.
- [5] A. N. Rudenko, S. Yuan, and M. I. Katsnelson, “Toward a realistic description of multilayer black phosphorus: From GW approximation to large-scale tight-binding simulations,” *Physical Review B*, vol. 92, p. 085419, Aug. 2015.
- [6] D. J. P. de Sousa, L. V. de Castro, D. R. da Costa, J. M. Pereira, and T. Low, “Multilayered black phosphorus: From a tight-binding to a continuum description,” *Physical Review B*, vol. 96, p. 155427, Oct. 2017.

- [7] J. Dai and X. C. Zeng, “Bilayer phosphorene: Effect of stacking order on bandgap and its potential applications in thin-film solar cells,” *The Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 5, pp. 1289–1293, Mar. 2014.
- [8] S. Datta, *Quantum Transport: Atom to Transistor; 2nd ed.* Cambridge University Press, 2005.
- [9] T. Stegmann, *Quantum transport in nanostructures: From the effects of decoherence on localization to magnetotransport in two-dimensional electron systems.* PhD thesis, University Duisburg-Essen, 2014.
- [10] R. Landauer, “Electrical transport in open and closed systems,” *Zeitschrift for Physik B Condensed Matter*, vol. 68, pp. 217–228, June 1987.
- [11] Y. Betancur-Ocampo, F. Leyvraz, and T. Stegmann, “Electron optics in phosphorene pn junctions: Negative reflection and anti-super-klein tunneling,” *Nano Letters*, vol. 19, pp. 7760–7769, Sept. 2019.
- [12] A. Carvalho, M. Wang, X. Zhu, A. S. Rodin, H. Su, and A. H. C. Neto, “Phosphorene: from theory to applications,” *Nature Reviews Materials*, vol. 1, p. 16061, Aug. 2016.
- [13] M. Ghashghaee, Z. Azizi, and M. Ghambarian, “Substitutional doping of black phosphorene with boron, nitrogen, and arsenic for sulfur trioxide detection: a theoretical perspective,” *Journal of Sulfur Chemistry*, vol. 41, no. 4, pp. 399–420, 2020.
- [14] P. E. Allain and J. N. Fuchs, “Klein tunneling in graphene: optics with massless electrons,” *The European Physical Journal B*, vol. 83, p. 301–317, Oct 2011.
- [15] D. J. Griffiths, *Introduction to electrodynamics; 4th ed.* Boston, MA: Pearson, 2013. Re-published by Cambridge University Press in 2017.