

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO

FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA

ESCUELA PROFESIONAL DE FÍSICA



**“PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y DE TRANSPORTE DE NANOCINTAS DE
GRAFENO Y DICALCOGENUROS DE METALES DE TRANSICIÓN MEDIANTE LA
INTERACCIÓN ESPÍN-ÓRBITA USANDO EL MÉTODO *TIGHT BINDING*”**

**TESIS PARA OPTAR EL TÍTULO PROFESIONAL
DE LICENCIADO EN FÍSICA**

JORGE LUIS HUAMANÍ CORREA

Callao, 2022

PERÚ

ACTA DE SUSTENTACION DE TESIS

En el ambiente virtual, asignado con el enlace: <http://meet.google.com/hfh-bdud-nae> mediante el uso de la aplicación Google Meet para video conferencias, desde el domicilio de cada uno de los docentes integrantes del Jurado, a causa del estado de Emergencia Nacional, debido al Coronavirus (COVID-19); siendo las 18:00 horas del Jueves veintinueve de diciembre del año dos mil veintidós, se reunieron en Sesión Virtual a fin de proceder al acto de instalación del Jurado de Sustentación de la Tesis presentada por el Señor Bachiller **HUAMANI CORREA JORGE LUIS**, titulado: **“PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y DE TRANSPORTE DE NANOCINTAS DE GRAFENO Y DICALCOGENUROS DE METALES DE TRANSICIÓN MEDIANTE LA INTERACCIÓN ESPÍN-ÓRBITA USANDO EL MÉTODO TIGHT BINDING”** Jurado asistente que está integrado por los siguientes docentes de la Facultad de Ciencias Naturales y Matemática de la Universidad Nacional del Callao:

Dr. GONZALES ORMEÑO, Pablo Guillermo	: Presidente
Dr. LOZANO BARTRA, Whualkuer Enrique	: Vocal
Dr. MÉNDEZ VELÁSQUEZ, Juan Abraham	: Secretario

Luego de la instalación, se dio lectura, por el secretario del Jurado, de la **Resolución Decanal N° 179-2022-D-FCNM** que designa a los miembros del Jurado Evaluador del Trabajo de Tesis. A continuación, se procedió con el inicio la exposición del Trabajo de Tesis, siendo las 18:00; y de acuerdo a lo normado por el Art. 82° del Reglamento de Grados y Títulos de la Universidad Nacional del Callao, aprobado por Resolución N° 245-2018-CU de fecha 30.10.2018. Culminado el acto de exposición, los señores miembros del Jurado asistente a formular las preguntas al indicado Bachiller, las mismas que fueron respondidas.

Luego de un cuarto intermedio, para la deliberación en privado del Jurado asistente y después de calificar el Trabajo de Tesis referido-líneas arriba, se **ACORDÓ CALIFICAR** la Tesis sustentada por el Señor Bachiller **HUAMANI CORREA JORGE LUIS**, para optar el **Título Profesional de Licenciado en Física**, según la puntuación cuantitativa y cualitativa que a continuación se indica:

Calificación cuantitativa	Calificación cualitativa
18	Excelente

Finalmente, se procedió a leer en público el acta de sustentación redactada por el secretario del Jurado de Tesis. Siendo las **19:00** horas del día veintinueve de diciembre del año dos mil veintidós, el señor presidente del Jurado dio por concluido el acto de sustentación de tesis. En señal de conformidad con lo actuado, se levanta la presente acta con las siguientes firmas:



Dr. Pablo Guillermo Gonzales Ormeño
Presidente



Dr. Whualkuer Enrique Lozano Bartra
Vocal



Dr. Juan Abraham Méndez Velásquez
Secretario

INFORMACIÓN BÁSICA

FACULTAD: Facultad de Ciencias Naturales y Matemática.

UNIDAD DE INVESTIGACIÓN DE LA FCNM.

TÍTULO: Propiedades electrónicas y de transporte de nanocintas de grafeno y dicalcogenuros de metales de transición mediante la interacción espín-órbita usando el método *tight binding*.

AUTOR: Bach. Jorge Luis Huamaní Correa, **DNI:** 45005674.

ASESOR: Dr. Walter Flores Vega, **DNI:** 06228417.

LUGAR DE EJECUCIÓN: Universidad Nacional del Callao e Instituto de Física de la Universidad de Brasília.

TIPO DE INVESTIGACIÓN: Básica.

UNIDAD DE ANÁLISIS: transporte de carga en nanocintas de grafeno y dicalcogenuros de metales de transición.

TIPO- ENFOQUE: Física de materiales en dos dimensiones.

Dedicatória

Esta tesis la dedico a todas aquellas personas que me apoyaron de manera directa e indirecta en mi crecimiento emocional.

Agradecimientos

En primer lugar agradezco a Dios por mi existencia, y por guiarme en cada etapa de mi vida. A mi familia por el apoyo incondicional, a mi papá Efraín y a mi madre Delmira, así como a mis hermanos César y Carolina, también como a mis sobrinos por el cariño que siempre recibo de ellos. Mi especial consideración y agradecimiento a mi asesor Dr. Walter Flores Vega por el apoyo brindado en cada etapa de la tesis. Agradezco al Prof. Dr. Fanyao Qu por la ayuda proporcionada en la utilización del cluster para el cálculo numérico así como a la Universidad de Brasilia (UnB), de la misma forma al prof. Dr. Marcos Figueira por el apoyo brindado en la parte analítica y numérica del presente trabajo. A los amigos de Brasil por las discusiones fructíferas realizadas en el presente trabajo de investigación. A mis amigos de Team Life Runners y de las ranas por su apoyo incondicional en cada momento de las carreras y fuera de ellas.

Jorge Huamaní Correa

RESUMEN

En el presente trabajo de investigación, analizamos las propiedades electrónicas y de transporte en nanocintas *zigzag* de grafeno y de dicalcogenuros de metales de transición, en este último nos enfocamos en un caso particular que es el Molibdenio de azufre MoS_2 . Para estudiar las propiedades mencionadas, hacemos uso del método *Tight Binding*, asimismo para el estudio de las propiedades de transporte electrónico tales como la conductancia y la polarización, hacemos uso del método recursivo de las funciones de Green en el formalismo Landauer-Büttiker. Estudiamos las estructuras de banda, densidad de estados de las nanocintas bajo la interacción espín-órbita y hacemos una comparación entre los dos tipos de sistemas, donde nuestros resultados se centran en la aplicabilidad de dispositivos basados en el grado de libertad de espín en la denominada espintrónica.

ABSTRACT

In the present research work, we analyze the electronic and transport properties of graphene and transition metal dichalcogenides zigzag nanoribbons, in the latter, we focus on a particular case that is the Molybdenum disulfide MoS_2 . To study the mentioned properties, we used the Tight Binding method, as well as the study of electronic transport properties such as conductance and polarization, we used the recursive method of Green's functions in the Landauer Büttiker formalism. We studied the band structures, the density of states of the nanoribbons under the spin-orbit interaction and we made a comparison between the types of systems, from which our results focus on the applicability of devices based on the degree of freedom from spin in the so-called spintronics.

ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN	1
2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	3
2.1. DESCRIPCIÓN DE LA REALIDAD PROBLEMÁTICA	3
2.2. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA.....	3
2.2.1. GENERAL	3
2.2.2. ESPECÍFICOS.....	3
2.3. OBJETIVOS DE LA INVESTIGACIÓN	4
2.3.1. GENERAL	4
2.3.2. ESPECÍFICOS.....	4
2.4. LIMITANTES DE LA INVESTIGACIÓN	4
3. MARCO TEÓRICO	5
3.1. ANTECEDENTES DE ESTUDIO.....	5
3.2. BASES TEÓRICAS.....	5
3.2.1. APROXIMACIÓN <i>Tight-Binding</i> O DE ENLACE FUERTE	6
3.2.2. APROXIMACIÓN <i>Tight binding</i> EN UNA NANOCINTA <i>zigzag</i> DE GRAFENO	8
3.2.3. APROXIMACIÓN <i>Tight binding</i> EN UNA NANOCINTA <i>zigzag</i> DE DMT	13
3.3. FORMALISMO DE LAS FUNCIONES DE GREEN	16
3.4. TRANSPORTE ELECTRÓNICO	18
3.4.1. FORMALISMO DE LANDAUER-BÜTTIKER	18
3.4.2. CINTA FINITA UNIDA A CONTACTOS SEMI-INFINITOS	20
3.5. ACOPLAMIENTO ESPÍN-ÓRBITA	23
3.5.1. ACOPLAMIENTO ESPÍN-ÓRBITA RASHBA.....	25
3.5.2. ACOPLAMIENTO ESPÍN-ÓRBITA INTRÍNSECO	26
3.6. CONCEPTUAL	26
3.7. DEFINICIÓN DE TÉRMINOS BÁSICOS	26
4. HIPÓTESIS Y VARIABLES	28
4.1. HIPÓTESIS.....	28
4.1.1. GENERAL	28
4.1.2. ESPECÍFICOS.....	28
4.2. DEFINICIÓN CONCEPTUAL DE VARIABLES	28
4.2.1. OPERACIONALIZACIÓN DE VARIABLE	28
5. DISEÑO METODOLÓGICO	30
5.1. TIPO Y DISEÑO DE INVESTIGACIÓN	30
5.2. MÉTODO DE INVESTIGACIÓN	30
5.3. POBLACIÓN Y MUESTRA.....	30

5.4.	LUGAR DE ESTUDIO	30
5.5.	TÉCNICAS E INSTRUMENTOS PARA LA RECOLECCIÓN DE LA INFORMACIÓN	31
5.6.	ANÁLISIS Y PROCESAMIENTO DE DATOS.....	31
6.	RESULTADOS.....	32
6.1.	PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y DE TRANSPORTE EN NANOCINTAS <i>zigzag</i> DE GRAFENO	32
6.1.1.	EFFECTO DEL ACOPLAMIENTO ESPÍN-ÓRBITA RASHBA EN LAS NANOCINTAS ZIG-ZAG DE GRAFENO.....	32
6.1.2.	EFFECTO DEL ACOPLAMIENTO ESPÍN-ÓRBITA INTRÍNSECO EN NANOCINTAS <i>zigzag</i> DE GRAFENO	33
6.1.3.	PROPIEDADES DE TRANSPORTE EN LA AUSENCIA DE ESPÍN-ÓRBITA EN NANOCINTAS <i>zigzag</i> DE GRAFENO	35
6.1.4.	PROPIEDADES DE TRANSPORTE EN LA PRESENCIA DE ESPÍN-ÓRBITA EN NANOCINTAS <i>zigzag</i> DE GRAFENO	36
6.2.	PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y DE TRANSPORTE EN NANOCINTAS <i>zigzag</i> DE MoS_2	38
6.2.1.	ESTADOS DE BORDA EN UNA NANOCINTA <i>zigzag</i> DE MoS_2	38
6.2.2.	EFFECTO DEL ACOPLAMIENTO ESPÍN-ÓRBITA RASHBA SOBRE LOS ESTADOS DE BORDE DE NANOCINTAS <i>zigzag</i> DE MoS_2	39
6.2.3.	EFFECTO DEL ACOPLAMIENTO ESPÍN-ÓRBITA RASHBA SOBRE LA CONDUCTANCIA CUÁNTICA DE ESPÍN Y POLARIZACIÓN DE ESPÍN.....	40
7.	DISCUSIÓN DE RESULTADOS	45
7.1.	CONSTRATACIÓN DE HIPÓTESIS CON LOS RESULTADOS	45
7.2.	CONTRASTACIÓN DE RESULTADOS CON OTROS ESTUDIOS SIMILARES	45
8.	CONCLUSIONES.....	46
9.	RECOMENDACIONES	47
	REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	48
	APÉNDICES	52
I.1.	MATRIZ DE CONSISTENCIA.....	53
I.2.	MÉTODO RECURSIVO DE LAS FUNCIONES DE GREEN	54
I.2.1.	FUNCIONES DE GREEN DE LA IZQUIERDA	55
I.2.2.	FUNCIONES DE GREEN DE LA DERECHA	56
I.2.3.	FUNCIONES DE GREEN TOTAL	57

LISTA DE FIGURAS

3.1. Imagen esquemática de una NZGR, donde la región puntillada verde M denota la celda unitaria donde los hoppings t , t' y t'' representan las interacciones entre átomos de primeros, segundos y terceros vecinos respectivamente. N indica el ancho de la nanocinta dado por el número de líneas <i>zigzag</i> y A y B etiquetan los átomos de las dos subredes inequivalentes.	9
3.2. Estructura de banda de una NZGR con N= 3 (rojo) y N= 4 (azul). En la ausencia del <i>hopping</i> de los terceros vecinos ($t'' = 0$), los estados de borde generan una banda plana en el nivel de Fermi ($E_F = 0$) como mostrado en (a) y (c). El efecto neto del <i>hopping</i> de los terceros vecinos ($t'' = 0,15t$) es dar lugar a una banda entrelazada en los diferentes puntos de Dirac en el nivel de Fermi como mostrado en (b) y (d). El número de estos puntos depende de N, como expuesto en el <i>inset</i> de (d).	12
3.3. Estructura de banda de una 20-NZGR. a) $t'' = 0$, b) $t'' = 0,15t$. La banda entrelazada en el nivel de Fermi en (b) no son visibles debido a los estados de borde se fusionan en una banda plana degenerada (a). Por otro lado, el <i>gap</i> de banda de los estados <i>bulk</i> disminuye como mostrado en (b).	13
3.4. Estructura de banda de una 6-NZGR. (a) $t'' = 0.30t$ y (b) $t'' = 0.15t$. Los entrelazamientos se tornan más prominentes para $t'' = 0.30t$.	14
3.5. Vista superior de una red de monocapa de MX_2 donde es mostrada la celda unitaria de una nanocinta <i>zigzag</i> . Las posiciones de los sitios de red son definidos por las coordenadas (m,n). Figura tomada de (1).	15
3.6. a) Vista superior de una monocapa de dicalcogenuro de metal de transición MX_2 . Esferas azul y amarillo denotan los átomos de metal (M) y calcogenuro (X) respectivamente, además \vec{R}_1 y \vec{R}_2 son los vectores posición de primeros vecinos entre átomos metálicos. b) Vista lateral de la estructura atómica de una monocapa de DMT. Seis vectores \vec{A}_i^\pm conectan los átomos vecinos M y X con $i = 1, 2, 3$, separados por una distancia $l = a/\sqrt{3}\cos\theta$ nm, a es la constante de red y θ es el ángulo entre el enlace $M - X$ y el plano M. c) Primera zona de Brillouin y puntos de alta simetría Γ , K and M de DMT en espacio recíproco de una red triangular. Sus vectores de red primitivos son denotados por \vec{b}_1 y \vec{b}_2 . Figura tomada de (1).	16
3.7. Estructura de banda de una nanocinta <i>zigzag</i> de MoS_2 considerando $N = 10$.	17
3.8. Imagen esquemática de un dispositivo electrónico (conductor) unido a dos contactos, con potenciales químicos μ_1 y μ_2 sometidos a un potencial V .	19
3.9. Diagrama esquemática del dispositivo central (dispersión) conectado a dos contactos derecho e izquierdo. El acoplamiento entre los conductores y el dispositivo puede tomarse como una interacción efectiva descrita por las autoenergías $\Sigma_{R,L}$ en las interfaces	21
6.1. Estructura de banda de una 40-NZGR con acoplamiento EOR, para $\lambda_R = 0,05eV$, donde se puede observar claramente la quiebra de degenerescencia de espín.	34
6.2. Estructura de bandas de una NZGR (a) con $\lambda_{so} = 0,0eV$ (b) $\lambda_{so} = 0,039eV$. Observe que la interacción EOI no abre <i>gap</i> en la parte central, pero abre <i>gap</i> en los puntos K y K' .	35

6.3. (a) Densidad de estados de una nanocinta <i>zigzag</i> de grafeno (b) Conductancia eléctrica de una 8-NZGR.	35
6.4. Conductancia para una 20-NZGR y $\lambda_{so} = 0,039t$	36
6.5. Conductancia electrónica para 20-NZGR con acoplamiento EOR.	37
6.6. Conductancia para una 20-NZGR con efecto combinado de acoplamiento EOI y EOR, $\lambda_{so} = 0,039t$ e $\lambda_R = 0,05t$	38
6.7. (a) Estructura de banda electrónica, (b) densidad de estados, y (c) conductancia cuántica total para una nanocinta <i>zigzag</i> de MoS_2 . El ancho de la cinta de MoS_2 a ser escogida a ser $N = 10$	39
6.8. (a) Estructura de banda electrónica con $\lambda_R = 0$, (b) Estructura de banda electrónica considerando $\lambda_R = 0,05eV$. $N = 10$	40
6.9. Vista superior del dispositivo de nanocintas TMDC en <i>zigzag</i> , compuesto por una región central (C) conectada a los conductores semi-infinitos izquierdo (L) y derecho (R) (marcados en cian), donde l es el número de celdas unitarias (caja rectangular) de la parte central y W es su ancho, dado por el número de líneas en <i>zigzag</i> (N).	41
6.10. (a) Estructura de banda electrónica con $\lambda_R = 0$, (b) Estructura de banda electrónica considerando $\lambda_R = 0,05eV$. $N = 10$	42
6.11. Contorno de las tres componentes, P_x (a), P_y (b), P_z (c) y total P_t (d) de la polarización de espín para una nanocinta <i>zigzag</i> de MoS_2 con $N = 10$ y $l = 30$ como función del parámetro de espín-órbita Rashba y energía de Fermi.	43
1. Esquema de capas, donde el rectángulo central (naranja) contiene las capas que representan al conductor. Las capas con números menores a 1 representan el contacto de la izquierda y las capas con números mayores a N representan el contacto de la derecha.....	54

LISTA DE TABLAS

4.1. Operacionalización de variables	29
--	----

1 INTRODUCCIÓN

La era del Grafeno comenzó con el trabajo seminal de Novoselov et al. (2), que aisló láminas de cristal de grafito de un solo átomo de espesor. A bajas temperaturas, la densidad de los estados en grafeno exhibe un espacio en forma de V, y a bajas energías su relación de dispersión es lineal. Los electrones se comportan como partículas fermiónicas sin masa, obedeciendo a la ecuación de Dirac (3). Sin embargo, el grafeno no tiene brecha o (*gap* en inglés) y no se puede usar en microelectrónica. Por lo tanto, es necesario abrir y controlar esa brecha sin cambiar su movilidad. Una forma efectiva de abrir una brecha de banda es empleando el confinamiento electrónico, que es naturalmente presente en la estructura geométrica de nanocintas, colocando estos sistemas en excelentes candidatos para sustituir al silicio en aplicaciones tecnológicas (4). Sin embargo, desde el punto de vista experimental, su síntesis produce nanocintas con aspereza en sus bordes que presenta un efecto adverso sobre sus propiedades de transporte electrónico (5, 6). Pero esta situación puede cambiar debido a una reciente síntesis ascendente de 6-NZGR (7), [nanocinta *zigzag* de grafeno con 6 líneas *zigzag* de átomos de carbono con bordes en *zigzag* atómicamente precisos]. N-NZGR (donde N etiqueta el número de líneas *zigzag* de carbono) exhiben varios estados fundamentales. Ellos puede ser metálico, aislante o semiconductor, los cuales constituyen una frontera en la investigación de materiales a base de grafeno. Considerando los primeros vecinos mediante el método de *tight binding*, los estados de borde de NZGRs se acoplan ferromagnéticamente a lo largo del borde y antiferromagnéticamente entre ellos, pero una observación directa de los estados de borde polarizados en NZGRs todavía no se ha logrado, debido a la precisión limitada de técnicas de medición de corriente (7).

En ese sentido, desarrollamos un cálculo estricto en NZGR tomando en cuenta los *hoppings* de primeros y terceros vecinos usando el enfoque *tight - binding*. Las NZGR de grafeno exhiben estados de borde localizados, estados que se originan debido a la simetría quiral que está presente en la naturaleza de la red (8), que se asocia con la existencia de dos sub-redes no equivalentes A y B. La red se vuelve bipartita, y la simetría quiral está conectada a la simetría partícula-hueco de la estructura de banda. La importancia cualitativa del tercer *hopping* se discutió en un estudio de nanotubos de carbono de pared simple (9).

Por otro lado, desde el logro histórico del grafeno (3), los dicalcogenuros de metales de transición (DMT) se han explorado ampliamente debido a sus propiedades químicas, físicas únicas, así como su gran potencial para la electrónica posterior al silicio. Diferente al grafeno, la asimetría de inversión junto con un fuerte acoplamiento espín-órbita intrínseco (EOI) en las monocapas de DMT (MoS_2 , $MoSe_2$, WS_2 , WSe_2) conduce a la división de espín-valle dando lugar a características intrigantes para la espintrónica y la valletrónica que serán las nuevas ramas de la microelectrónica futura que estudia los grados de libertad del espín del electrón y valle de los puntos de alta simetría de la red (10).

Dado que las propiedades de transporte de un sistema son estrechamente correctas relacionado con su estructura de banda electrónica, se puede inferir que las propiedades de transporte de las NZGR son bastante diferentes a las de las nanocintas *zigzag* de DMT debido al número de orbitales localizados y al acoplamiento de dos tipos de átomos diferentes en el caso de DMT. Análogamente, el transporte cuántico en

estas nanocintas de DMT basadas en Molibdenio (Mo) también debe diferir de sus homólogos basados en Tungsteno (W) debido a su distinto acoplamiento EOI en la estructura de bandas. Además del efecto dado por el EOI, los bordes de grafeno en *zigzag* y nanocintas DMT también son fundamentalmente diferentes. Específicamente, los átomos en ambos bordes de los NZGR son obviamente lo mismo, mientras que en las nanocintas DMT corresponden a diferentes especies atómicas y, por lo tanto, la simetría longitudinal siempre se rompe. Por lo tanto, un estudio comparativo de las propiedades de transporte de DMT y NZGR es crucial para comprender los papeles del EOI y el espín-órbita Rashba (EOR) extrínseco en diferentes materiales.

2 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

2.1. DESCRIPCIÓN DE LA REALIDAD PROBLEMÁTICA

Grafeno, una monocapa de átomos de carbono, fue primeramente estudiado teóricamente por Wallace (11) para describir la estructura del grafito. El grafito es un derivado del carbono que consiste en capas de grafeno superpuestas e debilmente acopladas. A pesar de su amplio estudio teórico, solamente fue posible su obtención experimental en 2004, mediante la técnica de esfoliación mecánica o comunmente llamada de técnica de la cinta adhesiva (2). Después de su descubrimiento, un gran número de trabajos teóricos y experimentales surgieron y actualmente es uno de los campos de investigación más estudiados. Después de esa sintetización, otros materiales bidimensionales han sido estudiados y sintetizados como por ejemplo los dicalcogenuros de metales de transición (MoS_2 , $MoSe_2$, $MoTe_2$ entre otros).

Nanocintas de grafeno de tipo *zigzag* siempre se han mostrado ser de tipo metálico, pero esta situación debería ser revisada debido a que puede ser estudiado este tipo de materiales usando átomos frios, por lo tanto efectos de vecinos cercanos no pueden ser despreciados. Además, es analizado que siempre el tipo de simetría longitudinal se preserva, pero esto no es del todo correcto si es que tenemos en cuenta el número de líneas pares e impares, con lo cual la polarización de la corriente cambiaría drásticamente.

Por otro lado, es visto en Salami et al (12), que en los DMT, solo se obtiene polarización en la dirección perpendicular a lo largo de la dirección de transporte, pero esto indica un vacío en las direcciones longitudinales o transversales que experimentalmente pueden ser encontrados como visto en (13), donde mediante interferómetros, fue posible medir las tres componentes de la polarización, por tanto es importante hacer un análisis minucioso y entender las polarizaciones en las otras direcciones.

2.2. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA

2.2.1. General

¿Se puede determinar la conductancia y polarización en las nanocintas de grafeno y dicalcogenuros de metales de transición considerando un modelo *tight binding*?

2.2.2. Específicos

- ¿Como la interacción espín-órbita afecta la polarización en las nanocintas de grafeno y dicalcogenuros de metales de transición?

- ¿Las nanocintas en ausencia de espín-órbita son metálicas?
- ¿Cual es la diferencia básica entre la aproximación *tight binding* y métodos de primeros principios en el cálculo de las propiedades electrónicas y de transporte en ambos materiales?

2.3. OBJETIVOS DE LA INVESTIGACIÓN

2.3.1. General

Determinar la estructura de banda, densidad de estados, conductancia y polarización en nanocintas con bordes *zigzag* de grafeno y dicalcogenuros de metales de transición.

2.3.2. Específicos

- Hacer un comparativo entre las estructuras de banda de grafeno y dicalcogenuros de metales de transición.
- Introducir los parámetros de espín-órbita y ver como es afectada la conductancia.
- Determinar si es posible encontrar polarización en las tres direcciones, x, y, z , en ambos materiales.

2.4. LIMITANTES DE LA INVESTIGACIÓN

Para el presente proyecto trabajaremos con nanocintas de anchura pequeña, ya que a medida que aumentamos el tamaño del sistema, la matriz aumenta el cual el principal limitante es el gasto computacional, para eso requeriremos de un cluster adecuado para el desarrollo del mismo. A pesar de eso, con nanocintas de anchura pequeña es posible obtener propiedades de transporte de alta calidad.

3 MARCO TEÓRICO

3.1. ANTECEDENTES DE ESTUDIO

El presente proyecto de investigación se basa en los siguientes antecedentes teóricos y computacionales, efectuados en los últimos años con el objetivo de comprender las diversas propiedades de las nanocintas de grafeno y dicalcogenuros de metales de transición.

En grafeno, los electrones se comportan como partículas fermiónicas sin masa obedeciendo a la ecuación de Dirac (3). Sin embargo, grafeno es un material sin *gap* y no puede ser usado en la microelectrónica. Por lo tanto es necesario abrir y controlar el *gap* sin cambiar sus propiedades. Una manera efectiva de abrir el *gap* es empleando un confinamiento electrónico el cual es presente en estructuras geométricas llamadas nanocintas haciendo de estos sistemas, excelentes candidatos para aplicaciones tecnológicas pos-silicio (4).

Sin embargo en las referencias (5, 6) fue visto que desde un punto de vista experimental, sintetizar y producir nanocintas de grafeno con alta limpieza sin destruir sus bordes presentaría un efecto adverso sobre sus propiedades electrónicas.

Pero esta situación puede cambiar a una reciente síntesis *bottom-up* de una nanocinta de grafeno de 6 átomos de carbono de anchura con bordes *zigzag* atómicamente precisas y esto fue señalado en la referencia (7).

Por otro lado, fue visto en (12) que solamente la polarización perpendicular (P_z) es encontrada en los Dicalcogenuros de metales de transición (MoS_2), y que un sustrato ferromagnético aumentaría esta cantidad. Debido a este modelo, no es posible obtener las polarizaciones en otras direcciones que son medibles en laboratorio.

3.2. BASES TEÓRICAS

Para nuestros cálculos de propiedades electrónicas usaremos el método de enlace fuerte o *tight binding* y para nuestros cálculos de transporte haremos uso del método de las funciones de Green recursivas para hallar la conductancia y densidad de estados, asimismo nuestras simulaciones contendrán una parte analítica y otra parte numérica.

3.2.1. Aproximación *Tight-Binding* o de enlace fuerte

Uno de los métodos estándar para calcular la estructura electrónica es el enfoque *Tight Binding* (TB) o también llamado de enlace fuerte. Para aplicar el método TB, los electrones deben estar estrechamente unidos a los átomos e interactuar débilmente con los estados y potenciales de los átomos circundantes del material. Como resultado, las funciones de onda de estos electrones serán bastante similares a los orbitales atómicos del átomo libre al que pertenece. Su energía debería estar bastante cerca de la energía de ionización del electrón en el átomo o ion libre, porque la interacción con los potenciales y estados en los átomos vecinos es débil (14). Este método fue propuesto originalmente por Bloch y las funciones de onda de los electrones se construyen a partir de una combinación lineal de orbitales atómicos localizados (CLOA) que pertenecen a diferentes átomos de la red. El modelo de enlace fuerte nos permite describir la estructura de la banda en toda la zona de Brillouin, con la ventaja de tener un bajo costo computacional. En general, el método produce buenos resultados cualitativos en grafeno y sistemas relacionados, como los nanotubos de carbono y las nanocintas. Siguiendo el enfoque de Saito (15), debido a la simetría translacional de la celda unitaria a lo largo de la dirección de los vectores de red \vec{a}_i , cualquier función de onda de la red satisface el teorema de Bloch. Matemáticamente, esta condición puede ser escrita como,

$$T_{\vec{a}_i} \Psi = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_i} \Psi, \quad (i = 1, \dots, 3), \quad (3.1)$$

donde T es el operador de translación a lo largo de los vectores de red \vec{a}_i , y \vec{k} es el vector de onda de Bloch. La función de onda puede ser definida de muchas formas, pero la forma más conocida es una combinación lineal de orbitales atómicos. Entonces, la función de onda $\Phi(\vec{k}, \vec{r})$ es definida como la suma sobre la función de onda atómica $\varphi(\vec{r} - \vec{R}_j)$ en el sitio j ,

$$\Phi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_j} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \varphi(\vec{r} - \vec{R}_j), \quad (j = 1, \dots, n), \quad (3.2)$$

donde \vec{R}_j es la posición del átomo y N es el número de celdas unitarias, y 3.2 satisface la condición de Bloch.

En un sólido, las funciones de onda $\Psi_j(\vec{k}, \vec{r})$ son definidas como una combinación lineal de las funciones de onda de Bloch

$$\Psi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{j'=1}^n C_{jj'}(\vec{k}) \Phi_{j'}(\vec{k}, \vec{r}), \quad (3.3)$$

donde $C_{jj'}$ son los coeficientes a ser determinados. Ya que las funciones $\Psi_j(\vec{k}, \vec{r})$ deberían satisfacer el teorema de Bloch, la suma en 3.3 es tomada solamente para orbitales de Bloch $\Phi_{j'}(\vec{k}, \vec{r})$. Dentro de este enfoque, los autovalores $E_{jj}(\vec{k}) (j = 1, \dots, n)$ son dados por

$$E_j(\vec{k}) = \frac{\langle \Psi_j | H | \Psi_j \rangle}{\langle \Psi_j | \Psi_j \rangle} = \frac{\int \Psi_j^* H \Psi_j d^3\vec{r}}{\int \Psi_j^* \Psi_j d^3\vec{r}}, \quad (3.4)$$

siendo H el hamiltoniano del sólido. Ahora reemplazando Eq. 3.3 en Eq. 3.4, tenemos

$$E_i(\vec{k}) = \frac{\sum_{j,j'=1}^n C_{ij}^* C_{ij'} \langle \Phi_j | H | \Phi_{j'} \rangle}{\sum_{j,j'=1}^n C_{ij}^* C_{ij'} \langle \Phi_j | \Phi_{j'} \rangle} = \frac{\sum_{j,j'=1}^n H_{jj'}(\vec{k}) C_{ij}^* C_{ij'}}{\sum_{j,j'=1}^n S_{jj'}(\vec{k}) C_{ij}^* C_{ij'}}. \quad (3.5)$$

hemos definido

$$H_{jj'}(\vec{k}) = \langle \Phi_j | H | \Phi_{j'} \rangle, \quad (3.6)$$

como matriz de transferencia integral, ya que describen el salto de electrones entre estados de diferentes sitios de la red y $S_{jj'}(\vec{k}) = \langle \Phi_j | \Phi_{j'} \rangle$ es la matriz de superposición integral conocida como *overlap*. Los coeficientes C_{ij} se calculan de tal forma que $E_i(\vec{k})$ deben ser mínimo, así, tenemos

$$\frac{\partial E_i(\vec{k})}{\partial \Phi_{ij}^*} = \frac{\sum_{j,j'=1}^n H_{jj'}(\vec{k}) \Phi_{ij'}}{\sum_{j,j'=1}^n S_{jj'}(\vec{k}) \Phi_{ij}^* \Phi_{ij'}} - \frac{\sum_{j,j'=1}^n H_{jj'}(\vec{k}) \Phi_{ij}^* \Phi_{ij'}}{\left(\sum_{j,j'=1}^n S_{jj'}(\vec{k}) \Phi_{ij}^* \Phi_{ij'} \right)^2} \sum_{j'=1}^n S_{jj'}(\vec{k}) \Phi_{ij'} = 0, \quad (3.7)$$

multiplicando ambos lados por $\sum_{j,j'=1}^n S_{jj'}(\vec{k}) \Phi_{ij}^* \Phi_{ij'}$, tenemos

$$\sum_{j'=1}^n H_{jj'}(\vec{k}) C_{ij'} = E_i(\vec{k}) \sum_{j'=1}^n S_{jj'}(\vec{k}) C_{ij'}, \quad (3.8)$$

y definiendo un vector columna

$$C_i = \begin{pmatrix} C_{i1} \\ C_{i2} \\ \vdots \\ C_{iN} \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

podemos escribir

$$H C_i = E_i(\vec{k}) S C_i, \quad (3.10)$$

solo tenemos una solución distinta de cero cuando

$$\det[H - E_i(\vec{k})S] = 0. \quad (3.11)$$

Esta es la bien conocida ecuación secular, la cual usaremos para encontrar la estructura de banda de una red hexagonal. A continuación usaremos el método TB para hallar las estructuras de banda de una NZGR y de MoS_2 .

3.2.2. Aproximación *Tight binding* en una nanocinta *zigzag* de grafeno

En esta parte aplicaremos el método TB para encontrar la estructura de banda de una NZGR, para tal objetivo definimos los varios *hoppings* incluidos en nuestro cálculo. Consideramos una representación pictórica de una NZGR como indicado en la Fig. 3.1, donde indicamos la celda unitaria por la caja verde punteada denotada por M, con el ancho de la nanocinta indicando el numero de líneas *zigzag* y denotada por N. Además los correspondientes vectores de primeros δ_i son dados por

$$\vec{\delta}_1 = (0, -a), \quad \vec{\delta}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}a}{2}, \frac{a}{2} \right), \quad \vec{\delta}_3 = \left(-\frac{\sqrt{3}a}{2}, \frac{a}{2} \right), \quad (3.12)$$

además, de la Fig.3.1 tenemos seis segundos vecinos del átomo A (denotado por el círculo naranja)

$$\vec{\tau}_{1,2} = \left(\frac{\pm\sqrt{3}a}{2}, -\frac{3a}{2} \right), \quad \vec{\tau}_{3,4} = \left(\frac{\pm\sqrt{3}a}{2}, \frac{3a}{2} \right), \quad \vec{\tau}_{5,6} = (\pm\sqrt{3}a, 0), \quad (3.13)$$

y los terceros vecinos(\vec{d}_i)

$$\vec{d}_1 = (0, 2a), \quad \vec{d}_2 = (\sqrt{3}a, -a), \quad \vec{d}_3 = (-\sqrt{3}a, -a). \quad (3.14)$$

donde $a \approx 1,42\text{\AA}$ nm es la distancia carbono-carbono en grafeno y definimos $a_z = \sqrt{3}a$ como la magnitud del vector de red de las nanocintas de grafeno.

El Hamiltoniano de las nanocintas *zigzag* considerando los primeros, segundos y terceros *hopping* es dado por (16)

$$\begin{aligned} H_z = \sum_{m,n} \sum_{\alpha}^{M,N} \{ & -t[|A, m, n, \alpha\rangle \langle B, m - 1/2, n, \alpha| + |A, m, n, \alpha\rangle \langle B, m + 1/2, n, \alpha| \\ & + |A, m, n, \alpha\rangle \langle B, m, n - 1, \alpha|] - t'[|A, m, n, \alpha\rangle \langle A, m + 1/2, n + 1, \alpha| \\ & + |A, m, n, \alpha\rangle \langle A, m + 1/2, n - 1, \alpha| + |A, m, n, \alpha\rangle \langle A, m - 1/2, n + 1, \alpha| \\ & + |A, m, n, \alpha\rangle \langle A, m - 1/2, n - 1, \alpha| + |A, m, n, \alpha\rangle \langle A, m + 1, n, \alpha| \\ & + |A, m, n, \alpha\rangle \langle B, m - 1, n, \alpha| - t''[|A, m, n, \alpha\rangle \langle B, m, n + 1, \alpha| \\ & + |A, m, n, \alpha\rangle \langle B, m + 1, n - 1, \alpha| + |A, m, n, \alpha\rangle \langle B, m - 1, n - 1, \alpha|] + H.c. \}, \quad (3.15) \end{aligned}$$

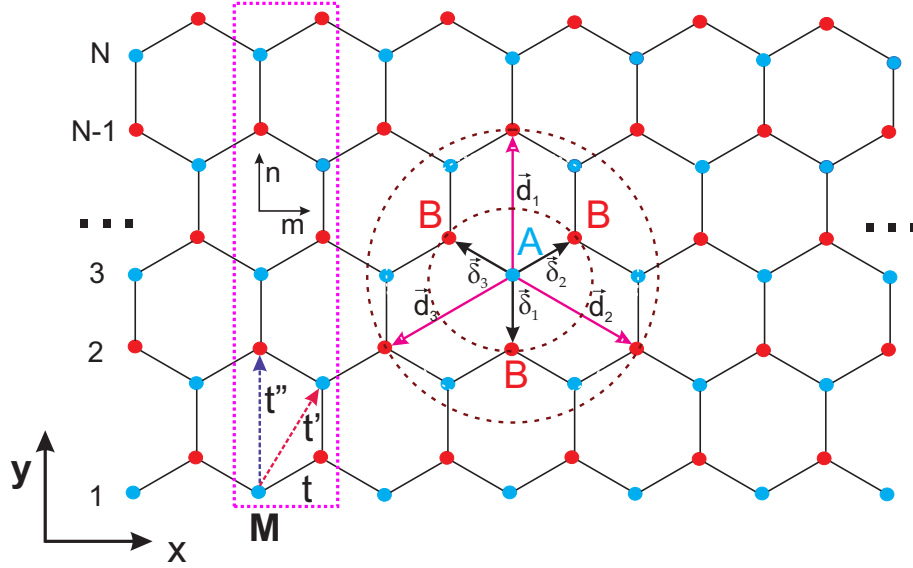


Figura 3.1: Imagen esquemática de una NZGR, donde la región puntillada verde M denota la celda unitaria donde los hoppings t , t' y t'' representan las interacciones entre átomos de primeros, segundos y terceros vecinos respectivamente. N indica el ancho de la nanocinta dado por el número de líneas *zigzag* y A y B etiquetan los átomos de las dos subredes inequivalentes.

establecemos H_z como el Hamiltoniano correspondientes a las nanocintas *zigzag*, donde α es el índice de spin y $H.c.$ es la conjugada compleja de los términos escritos. El signo negativo de los *hopping* es asociado a la formación de los estados alineados *bonding* y *anti-bonding* del orbital p_z en grafeno (17). Además, no consideramos los efectos de los *hoppings* de segundos vecinos ($t' = 0$) en los cálculos, ya que estamos interesados en preservar la simetría quiral del Hamiltoniano y este término la quiebra. Para derivar las relaciones de dispersión, aplicamos una transformada de Fourier al Hamiltoniano anterior a lo largo del eje translacionalmente invariante x

$$|\Psi(\vec{k}, \alpha)\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{m,n}^{M,N} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{m,n}} \{\psi_A(\vec{k}, n)|A, m, n, \alpha\rangle + \psi_B(\vec{k}, n)|B, m, n, \alpha\rangle\}, \quad (3.16)$$

donde $|\Psi(\vec{k}, \alpha)\rangle$ es la función de onda total, M es el número de celdas unitarias consideradas en el cálculo, N es el ancho de la nanocinta y $|A(B), m, n\rangle$ es el orbital de la sub-red $A(B)$ en la posición n de la celda unitaria m , definida por el vector $\vec{R}_m = m\vec{a}_z$. Para encontrar los autovalores del sistema, es necesario resolver la ecuación de Schrödinger y por simplicidad, consideramos la matriz *overlap* S como unitaria. De la Eq. 3.16 podemos escribir la función de onda de Bloch como

$$|\phi_A(\vec{k}, n'', \alpha)\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{m''}^M e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{m''}} |A, m'', n'', \alpha\rangle, \quad (3.17)$$

$$|\phi_B(\vec{k}, n', \alpha)\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{m'}^M e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{m'}} |B, m', n', \alpha\rangle. \quad (3.18)$$

En los siguientes cálculos, por simplicidad, emitimos los índices de espín α y usaremos la Ec. 3.17 y

la Ec. 3.18, para calcular los elementos de la matriz Hamiltoniana como considerada por la Ec. 3.15. De esta manera, el elemento de matriz $\langle \phi_A(\vec{k}, n'') | H_z | \phi_B(\vec{k}, n') \rangle$, puede ser escrito como

$$\langle \phi_A(\vec{k}, n'') | H_z | \phi_B(\vec{k}, n') \rangle = \frac{1}{M} \sum_{m', m''}^M e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'} - \vec{R}_{m''})} \langle A, m'', n'' | H_z | B, m', n' \rangle, \quad (3.19)$$

reemplazando explícitamente el Hamiltoniano H_z , tenemos

$$\begin{aligned} \langle \phi_A(\vec{k}, n'') | H_z | \phi_B(\vec{k}, n') \rangle = & -\frac{1}{M} \sum_{m', m''}^M \sum_{m, n}^{M, N} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'} - \vec{R}_{m''})} \times \\ & \{t[\langle A, m'', n'' | A, m, n \rangle \langle B, m, n-1 | B, m', n' \rangle \\ & + \langle A, m'', n'' | A, m, n \rangle \langle B, m-1/2, n | B, m', n' \rangle \\ & + \langle A, m'', n'' | A, m, n, \rangle \langle B, m+1/2, n | B, m', n' \rangle] \\ & + t''[\langle A, m'', n'' | A, m, n \rangle \langle B, m, n+1 | B, m', n' \rangle + \\ & + \langle A, m'', n'' | A, m, n \rangle \langle B, m+1, n-1 | B, m', n' \rangle \\ & + \langle A, m'', n'' | A, m, n, \rangle \langle B, m-1, n-1 | B, m', n' \rangle] + H.c. \}, \quad (3.20) \end{aligned}$$

los términos asociados a la misma sub-red son funciones delta

$$\langle A, m'', n'' | A, m', n' \rangle = \delta_{m'm''} \delta_{n'n''}. \quad (3.21)$$

Aplicando las funciones delta, tenemos

$$\begin{aligned} \langle \phi_A(\vec{k}, n'') | H_z | \phi_B(\vec{k}, n') \rangle = & \frac{1}{M} \sum_{m', m''}^M \sum_{m, n}^{M, N} \delta_{m''m} \delta_{n''n} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'} - \vec{R}_{m''})} \times \\ & \{-t[\delta_{mm'} \delta_{(n-1)n'} + \delta_{(m+1/2)m'} \delta_{nn'} + \delta_{(m-1/2)m'} \delta_{nn'}] \\ & - t''[\delta_{mm'} \delta_{(n+1)n'} + \delta_{(m+1)m'} \delta_{(n-1)n'} + \delta_{(m-1)m'} \delta_{(n-1)n'}] + H.c. \}, \quad (3.22) \end{aligned}$$

con un poco de álgebra y simplificando las notaciones y omitiendo la dependencia en el vector \vec{k} de los elementos de matriz, obtenemos las siguientes relaciones

$$\langle \phi_{An} | H_z | \phi_{B(n-1)} \rangle = -t, \quad (3.23)$$

$$\langle \phi_{An} | H_z | \phi_{Bn} \rangle = -t \left(e^{-ik_x a_z / 2} + e^{ik_x a_z / 2} \right), \quad (3.24)$$

$$\langle \phi_{An} | H_z | \phi_{B(n+1)} \rangle = -t'', \quad (3.25)$$

$$\langle \phi_{An} | H_z | \phi_{B(n-1)} \rangle = -t'' \left(e^{-ik_x a_z} + e^{ik_x a_z} \right), \quad (3.26)$$

empleando las correspondientes relaciones trigonométricas $e^{i\omega} + e^{-i\omega} = 2\cos(\omega)$, obtenemos

$$\langle \phi_{An} | H_z | \phi_{Bn} \rangle = -2t \cos\left(\frac{k_x a_z}{2}\right) \quad (3.27)$$

$$\langle \phi_{An} | H_z | \phi_{B(n-1)} \rangle = -2t'' \cos(k_x a_z). \quad (3.28)$$

En las nanocintas, debemos considerar la siguiente relación de contorno de los primeros vecinos (18)

$$\langle \phi_{A1} | H_z | \phi_{B0} \rangle = 0, \quad (3.29)$$

$$\langle \phi_{A(N+1)} | H_z | \phi_{BN} \rangle = 0, \quad (3.30)$$

y las condiciones de contorno para los terceros vecinos es

$$\langle \phi_{B1} | H_z | \phi_{A0} \rangle = 0, \quad (3.31)$$

como la matriz Hamiltoniana es Hermitiana, conseguimos las siguientes igualdades

$$\langle \phi_{BN} | H_z | \phi_{AN} \rangle = \langle \phi_{AN} | H_z | \phi_{BN} \rangle, \quad (3.32)$$

$$\langle \phi_{BN} | H_z | \phi_{A(N-1)} \rangle = \langle \phi_{AN} | H_z | \phi_{B(N-1)} \rangle, \quad (3.33)$$

y la matriz Hamiltoniana puede ser escrita como

$$E \begin{pmatrix} \psi_{A1} \\ \psi_{B1} \\ \psi_{A2} \\ \psi_{B2} \\ \vdots \\ \psi_{AN} \\ \psi_{BN} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & C & 0 & -t'' & 0 & \dots & 0 & 0 \\ C & 0 & -t + D & 0 & 0 & & 0 & 0 \\ 0 & -t + D & 0 & C & 0 & & 0 & 0 \\ -t'' & 0 & C & 0 & -t + D & & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 & C \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & C & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{A1} \\ \psi_{B1} \\ \psi_{A2} \\ \psi_{B2} \\ \vdots \\ \psi_{AN} \\ \psi_{BN} \end{pmatrix}, \quad (3.34)$$

con $C = -2t \cos\left(\frac{k_x a_z}{2}\right)$ and $D = -2t'' \cos(k_x a_z)$. De la matriz, podemos obtener las relaciones de dispersión asociadas a las diferentes sub-redes A y B

$$E\psi_A(\vec{k}, n, \alpha) = -t \left[\psi_B(\vec{k}, n, \alpha) 2 \cos\left(\frac{k_x a_z}{2}\right) + \psi_B(\vec{k}, n-1, \alpha) \right] - t'' \left[\psi_B(\vec{k}, n+1, \alpha) + \psi_B(\vec{k}, n-1, \alpha) 2 \cos(k_x a_z) \right], \quad (3.35)$$

$$E\psi_B(\vec{k}, n, \alpha) = -t \left[\psi_A(\vec{k}, n, \alpha) 2 \cos\left(\frac{k_x a_z}{2}\right) + \psi_A(\vec{k}, n+1, \alpha) \right] - t'' \left[\psi_A(\vec{k}, n-1, \alpha) + \psi_A(\vec{k}, n+1, \alpha) 2 \cos(k_x a_z) \right], \quad (3.36)$$

donde la solución de las ecuaciones anteriores pueden ser obtenidas numericamente.

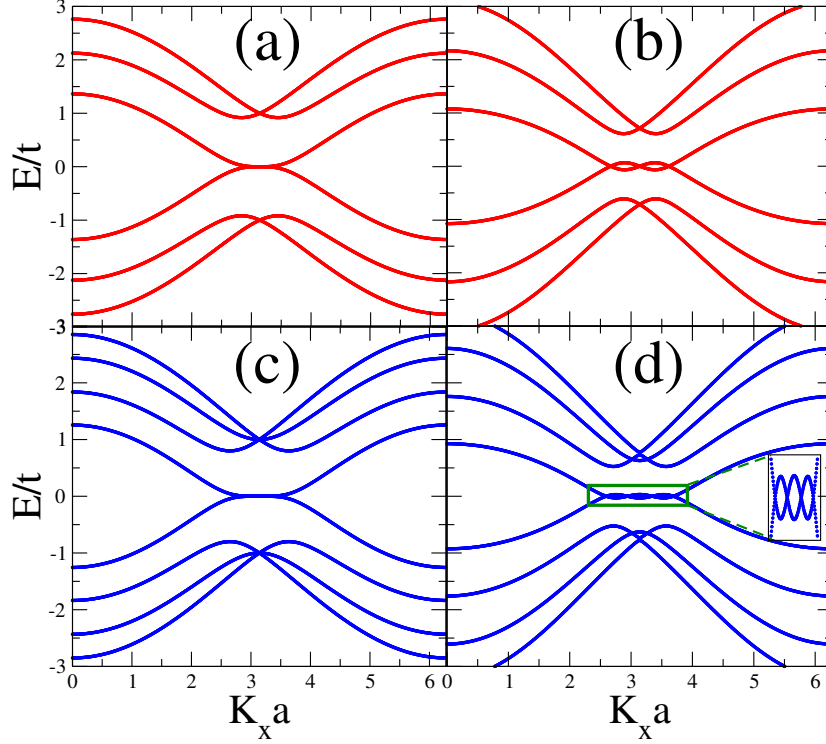


Figura 3.2: Estructura de banda de una NZGR con $N=3$ (rojo) y $N=4$ (azul). En la ausencia del *hopping* de los terceros vecinos ($t'' = 0$), los estados de borde generan una banda plana en el nivel de Fermi ($E_F = 0$) como mostrado en (a) y (c). El efecto neto del *hopping* de los terceros vecinos ($t'' = 0,15t$) es dar lugar a una banda entrelazada en los diferentes puntos de Dirac en el nivel de Fermi como mostrado en (b) y (d). El número de estos puntos depende de N , como expuesto en el *inset* de (d).

En la Fig. 3.2 mostramos la estructura de banda con $N=3, 4$. Cuando tomamos en cuenta solamente los *hoppings* de primeros vecinos ($t'' = 0$), las nanocintas *zigzag* son siempre metálicas. Los estados en el nivel de Fermi ($E_f = 0$) son siempre degenerados, y como consecuencia una banda plana aparece la cual se torna mas larga a medida que el número de líneas *zigzag* aumenta. Además, estos estados son llamados estados de borde, porque justamente se localizan hacia los bordes de la nanocinta y tienen una importante contribución en las propiedades electrónicas de NZGR (18).

En la Fig. 3.2(a,c) y en la Fig. 3.3(a) presentamos algunos ejemplos de la estructura de banda correspondiente a diferentes anchos de NZGR. Como mostrado en estas figuras, las nanocintas exhiben estados de borde localizados en una banda plana debido a la alta concentración electrónica en los bordes de la nanocinta y como consecuencia una alta densidad de estados en el nivel de Fermi $\rho(E_F = 0)$. Sin embargo, como señalado en (19, 18) cuando N es muy grande, la banda plana debera aparecer en el intervalo $2\pi/3 < |k_x a| \leq \pi$. De la Fig. 3.2 (a) y (c) es claro que esta regla no es cumplida. Contrariamente a ese

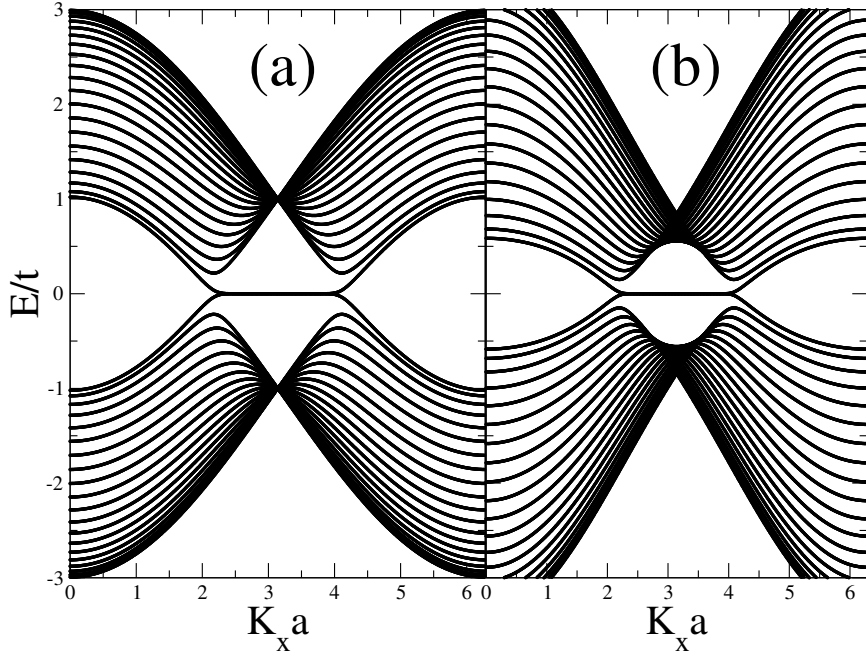


Figura 3.3: Estructura de banda de una 20-NZGR. a) $t'' = 0$, b) $t'' = 0,15t$. La banda entrelazada en el nivel de Fermi en (b) no son visibles debido a los estados de borde se fusionan en una banda plana degenerada (a). Por otro lado, el *gap* de banda de los estados *bulk* disminuye como mostrado en (b).

caso, en la Fig. 3.3(a) con $N = 20$, esta ley es completamente confirmada.

Ahora, considerando $t'' = 0,15t$, con ambos t y t'' teniendo el mismo signo, la situación cambia completamente, principalmente en nanocintas con poco ancho, como indicado en la Fig. 3.2(b) y Fig. 3.2(d). En el nivel de Fermi, los entrelazamientos de las bandas de valencia y de conducción generan conos de Dirac para vectores de onda no proporcionales \vec{k} . El número de puntos de Dirac depende del ancho de la nanocinta y si N es par o impar, como indicado en ambas figuras. En la Fig. 3.2(b) hay tres puntos de Dirac, donde uno de estos puntos es degenerado en el borde de la zona de Brillouin ($K_x a = \pi$), mientras que en la Fig.3.2(d) hay cuatro puntos de Dirac, como indicado claramente en su *inset*. Cuando N aumenta aparecen más puntos de Dirac points, pero ahora ellos se evanesen para valores grandes de N , formando una banda plana como mostrado en la Fig. 3.3(b).

Otro punto interesante es cuando aumentamos el parámetro t'' , como se muestra en la Fig. 3.4 (a) donde los entrelazamientos se amortiguan para $t = 0,3t$, este amortiguamiento es un efecto directo de las componentes transversales del salto de los terceros vecinos (el último término en el lado derecho de la ec. 3.35 y ec. 3.36). Este amortiguamiento no es visible en el recuadro de la Fig. 3.4 (b), donde hemos tomado $t'' = 0,15t$, pero se vuelve más prominente para valores más altos de t'' (20).

3.2.3. Aproximación *Tight binding* en una nanocinta *zigzag* de DMT

En esta parte de la tesis, nos centraremos en analizar nanocintas *zigzag* de un caso particular de un DMT: el disulfeto de Molibdenio MoS_2 , pero el formalismo matemático es igualmente aplicable a los demás tipos de DMT. Para el presente caso es tomada el número de líneas *zigzag* como mostrado en la Fig.

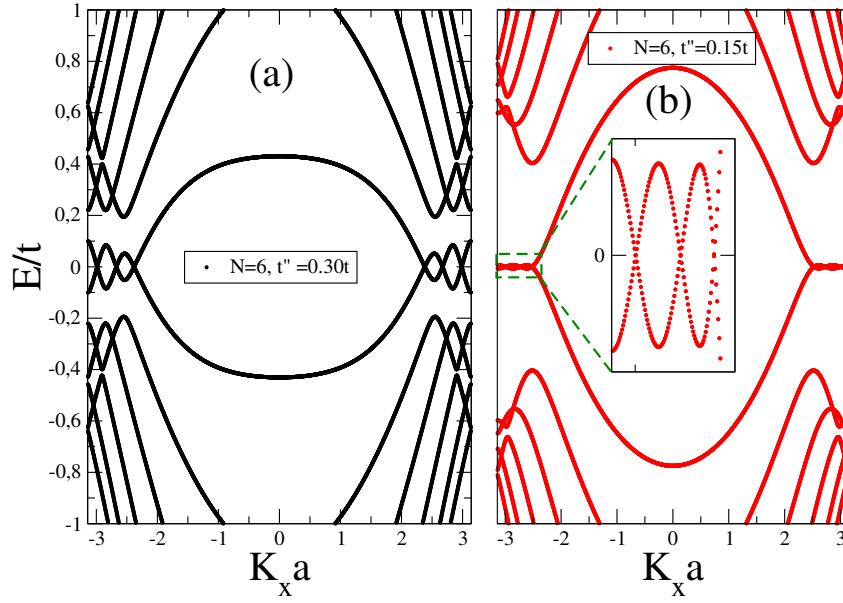


Figura 3.4: Estructura de banda de una 6-NZGR. (a) $t'' = 0.30t$ y (b) $t'' = 0.15t$. Los entrelazamientos se tornan más prominentes para $t'' = 0.30t$.

3.5, por otro lado en la Fig.3.6 vemos una vista superior de una nanocinta zigzag de MoS_2 (NZ- MoS_2) donde los vectores de red fundamental estan dados por

$$\vec{R}_1 = (a, 0, 0), \quad \vec{R}_2 = \left(\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}a}{2}, 0 \right) \quad (3.37)$$

donde a es la constante de red, las coordenadas de los vecinos más cercanos de un átomo de Mo son mostrados en la, donde θ es el ángulo entre el enlace $M - X$ y el plano de M . Asimismo en la Fig. 3.6 (c) se muestra la red recíproca mostrando los puntos de alta simetría K, K', M y los vectores de red recíproca b_1 y b_2 dados por

$$\vec{b}_1 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, 0 \right), \quad \vec{b}_2 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} (0, 1, 0) \quad (3.38)$$

A diferencia de las nanocintas de grafeno, donde las propiedades fundamentales vienen dadas por el orbital p_z y el acoplamiento espin-órbita es muy pequeño, en las nanocintas de DMT, las principales propiedades electrónicas vienen dadas por los orbitales 4d del átomo Mo y por los orbitales 3p del átomo S y por tanto estos materiales presentan fuerte acoplamiento EOI. (1, 21)

El Hamiltoniano de una nanocinta zigzag de DMT en el lenguaje de segunda cuantización H_0 , viene

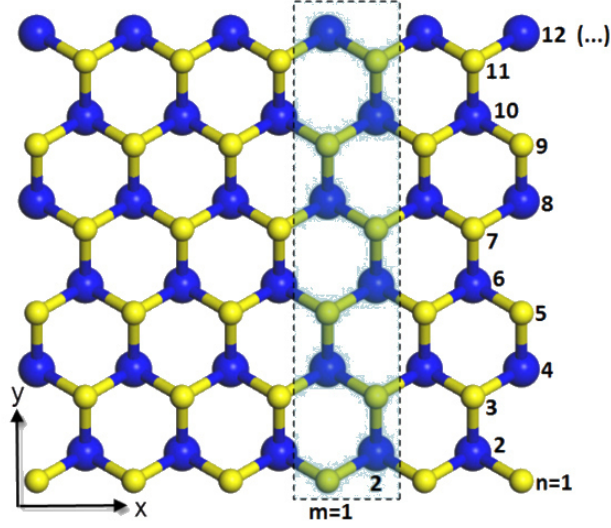


Figura 3.5: Vista superior de una red de monocapa de MX_2 donde es mostrada la celda unitaria de una nanocinta zigzag. Las posiciones de los sitios de red son definidos por las coordenadas (m,n) . Figura tomada de (1).

dado por (22)

$$\begin{aligned}
H_0 = & \sum_{i,\mu,s} (E_{i,\mu,s}^M a_{i,\mu,s}^\dagger a_{i,\mu,s} + E_{i,\mu,s}^X b_{i,\mu,s}^\dagger b_{i,\mu,s}) \\
& + \sum_{\langle i,j \rangle, \mu, \nu, s} t_{i,j;\mu,\nu}^{MX} a_{i,\mu,s}^\dagger b_{j,\nu,s} \\
& + \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \mu, \nu, s} (t_{i,j;\mu,\nu}^{MM} a_{i,\mu,s}^\dagger a_{j,\nu,s} + t_{i,j;\mu,\nu}^{XX} b_{i,\mu,s}^\dagger b_{j,\nu,s}) \\
& + \sum_{\langle\langle\langle i,j \rangle\rangle\rangle, \mu, \nu, s} (t_{i,j;\mu,\nu}^{MM} a_{i,\mu,s}^\dagger a_{j,\nu,s} + t_{i,j;\mu,\nu}^{XX} b_{i,\mu,s}^\dagger b_{j,\nu,s}) \\
& + \sum_{i,\mu,s,\nu,s'} \lambda_{\mu,\nu,s,s'} (a_{i,\mu,s}^\dagger a_{i,\nu,s'} + b_{i,\mu,s}^\dagger b_{i,\nu,s'}) + H.c., \tag{3.39}
\end{aligned}$$

aquí $E_{i,j,s}^{M,X}$ representan las energías de los sitios en los átomos $M(X)$, donde i y j corren sobre los sitios de red, ν y μ denotan los orbitales, s es el índice de espín, $a_{i,\mu,s}$ ($a_{i,\mu,s}^\dagger$) es el operador de aniquilación (creación) de un electrón en sitios de metales de transición ($M=Mo, W$), y $b_{i,\mu,s}$ ($b_{i,\mu,s}^\dagger$) se refiere al operador de aniquilación (creación) correspondiente en los sitios calcógenos ($X= S, Se, Te$). $\langle \rangle$, $\langle\langle \rangle\rangle$ y $\langle\langle\langle \rangle\rangle\rangle$ indica la suma de todos los primeros, segundos y cuartos vecinos más próximos, respectivamente. En ec. 3.39, el primer y segundo término comprenden las energías in situ para ambos elementos de los átomos M y X respectivamente, el tercer término contiene los primeros saltos de vecinos más cercanos, y los términos cuarto y quinto describen saltos dentro de los mismos elementos. $\lambda_{\mu,s,\nu,s'}$ es el parámetro EOI, donde s, s' indica la orientación del espín. Los parámetros de EOI correspondientes al MoS_2 son $\lambda_{Mo} = -0,080$ eV, y $\lambda_S = -0,052$ eV y H.c. significa el conjugado hermitiano. Para obtener más detalles sobre nuestra implementación de cálculo de TB bajo la aproximación de salto del segundo vecino más cercano de metales de transición y átomos de calcogeno, así como parámetros de órbita de espín intrínsecos relevantes para otras monocapas de DMT, consulte (1, 22). En la Fig. 3.7, es mostrada la estructura de

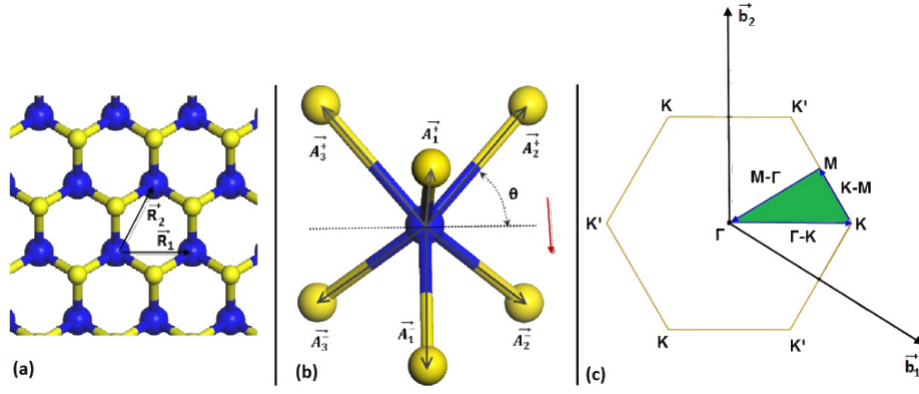


Figura 3.6: a) Vista superior de una monocapa de dicalcogenuro de metal de transición MX_2 . Esferas azul y amarillo denotan los átomos de metal (M) y calcogenuro (X) respectivamente, además \vec{R}_1 y \vec{R}_2 son los vectores posición de primeros vecinos entre átomos metálicos. b) Vista lateral de la estructura atómica de una monocapa de DMT. Seis vectores \vec{A}_i^\pm conectan los átomos vecinos M y X con $i = 1, 2, 3$, separados por una distancia $l = a/\sqrt{3}\cos\theta$ nm, a es la constante de red y θ es el ángulo entre el enlace $M - X$ y el plano M . c) Primera zona de Brillouin y puntos de alta simetría Γ , K and M de DMT en espacio recíproco de una red triangular. Sus vectores de red primitivos son denotados por \vec{b}_1 y \vec{b}_2 . Figura tomada de (1).

banda de una $NZ-MoS_2$ considerando $N=10$. Nuestro Hamiltoniano a sido construido en la siguiente base $|d_{z^2}\rangle, |d_{xy}\rangle, |d_{x^2-y^2}\rangle, |p_z^e\rangle, |p_x^e\rangle, |p_y^e\rangle \otimes |\uparrow, \downarrow\rangle$, where $p_z^e = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_z^t - p_z^b)$, $p_x^e = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_x^t - p_x^b)$ and $p_y^e = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_y^t - p_y^b)$ (1).

3.3. FORMALISMO DE LAS FUNCIONES DE GREEN

El enfoque de las funciones de Green es una herramienta importante dentro de la física, el concepto de funciones de Green, aparece en muchos aspectos de la física tal como mecánica clásica y electromagnetismo. La función de Green es definida como la solución de la ecuación diferencial no homogénea (23)

$$[\epsilon - H]\mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', z) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (3.40)$$

donde $\epsilon = E + i\eta$, con E siendo la energía real y η siendo una cantidad infinitesimal que garantiza la correcta convergencia de la función en el límite infinito, y H es el Hamiltoniano del sistema que tiene un conjunto completo de autofunciones, tal que

$$H(r)\psi_n(r) = E_n\psi_n(r). \quad (3.41)$$

Estas autofunciones (ψ_n) son elegidas a ser ortonormales y obedecen a la relación de completitud

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{n,m} ; \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = 1, \quad (3.42)$$

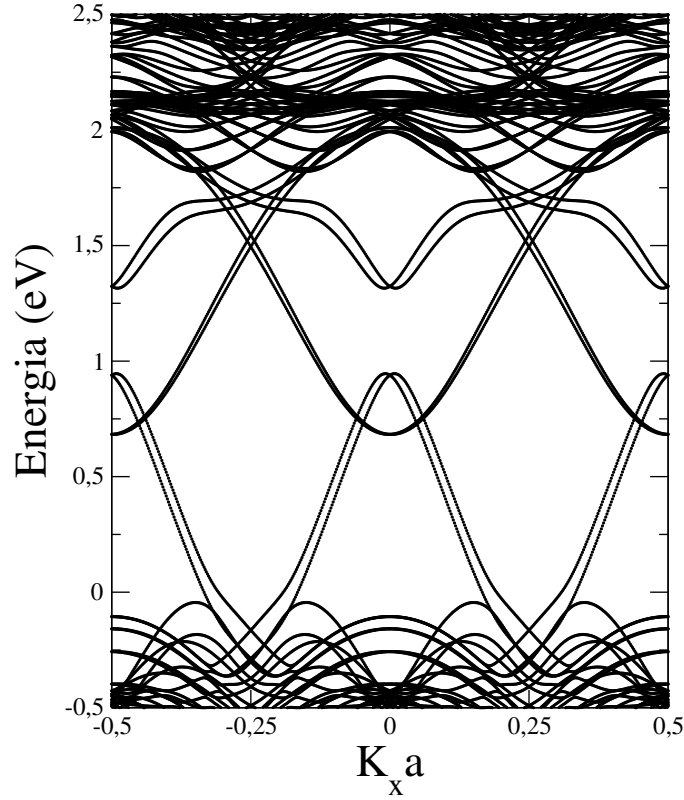


Figura 3.7: Estructura de banda de una nanocinta zigzag de MoS_2 considerando $N = 10$.

además, en la notación Dirac, la función de Green definida en ec. 3.40 puede ser expresada como

$$\mathcal{G}_z = \frac{1}{z - H}, \quad (3.43)$$

el cual, empleando la relación de completeza podemos escribirla

$$\mathcal{G}(z) = \frac{1}{z - H} \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \sum_n \frac{|\psi_n\rangle\langle\psi_n|}{\epsilon - E_n}, \quad (3.44)$$

el cual puede ser escrita en la representación de coordenadas como

$$\mathcal{G}(r, r', \epsilon) = \sum_n \frac{\psi_n(r)\psi_n^*(r')}{\epsilon - E_n}. \quad (3.45)$$

Así, es más conveniente separar la función de Green dentro de un semiplano complejo inferior y superior para definir la función de Green avanzada \mathcal{G}^+ y la función de Green retardada \mathcal{G}^- , respectivamente

$$\mathcal{G}^\pm(r, r', E) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \mathcal{G}^\pm(r, r', E \pm i\eta), \quad (3.46)$$

usando la relación de Cauchy

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm i\eta} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x), \quad (3.47)$$

donde P es llamado de valor principal (23), podemos escribir la ec. 3.45 como

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^{\pm}(r, r, E) &= \lim_{\eta \rightarrow 0} \sum_n \frac{\psi_n(r)\psi_n^*(r)}{E \pm i\eta - E_n} \\ &= \sum_n |\psi_n(r)|^2 \left\{ P \left[\frac{1}{E - E_n} \right] \mp \delta(E - E_n) \right\},\end{aligned}\quad (3.48)$$

calculando la parte imaginaria de la traza, obtenemos la densidad de estados

$$\rho(E) = \mp \frac{1}{\pi} \text{ImTr}[\mathcal{G}^{\pm}(E)]. \quad (3.49)$$

3.4. TRANSPORTE ELECTRÓNICO

El transporte electrónico es una de las áreas de investigación más importantes de los dispositivos electrónicos nanoscópicos. A medida que estos dispositivos se vuelven de dimensiones atómicas, la teoría del transporte clásico ya no es válida para explicar la nueva física que aparece y, como consecuencia importante, la ley de Ohm falla. Este es el límite donde interviene la mecánica cuántica como herramienta para explicar la rica fenomenología que aparece cuando las dimensiones del dispositivo se reducen de esa forma. La elección de un método apropiado para describir las propiedades del transporte electrónico y que presente un bajo costo computacional y buena precisión numérica es fundamental. El método de las funciones de Green en el formalismo Landauer-Büttiker, da como resultado un marco adecuado para realizar cálculos de conductancia eléctrica en nanocintas bidimensionales. En este capítulo, presentamos las ideas principales del formalismo de Landauer-Büttiker que utilizaremos para desarrollar el método recursivo de las funciones de Green.

3.4.1. Formalismo de Landauer-Büttiker

El método comúnmente utilizado para describir las propiedades de transporte de electrones de los dispositivos nanoscópicos es el formalismo de Landauer-Büttiker, que describe la corriente eléctrica a través de un conductor en términos de su transmitancia electrónica. Para entender este método, asumimos que contactos semi-infinitos o conductores están conectados a un dispositivo central, que actúa como una región de dispersión entre los conductores (Fig. 3.8). Los contactos se consideran transparentes, es decir, los electrones pasan a través de ellos con mínima probabilidad de reflexión. Para calcular la corriente eléctrica aplicamos un potencial al conductor, de tal forma que los electrones se ven obligados a pasar del contacto 1 (izquierda) al contacto 2 (derecha). Cuando los electrones están en la interfaz entre el contacto 1 y el conductor, hay una barrera que cruzar, lo que lleva a una probabilidad de transmisión para alcanzar el contacto 2 y viceversa (24). Por lo tanto, definimos la corriente total I_T que fluye a través del conductor como

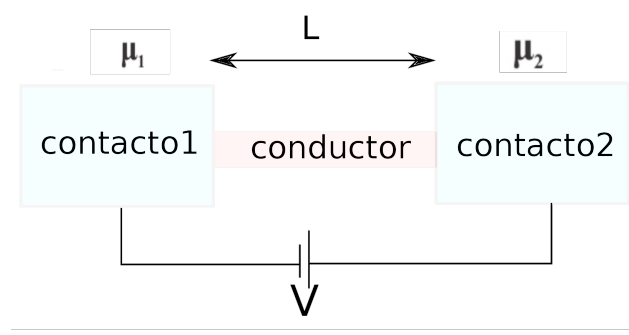


Figura 3.8: Imagen esquemática de un dispositivo electrónico (conductor) unido a dos contactos, con potenciales químicos μ_1 y μ_2 sometidos a un potencial V .

$$I = I_{12} + I_{21}, \quad (3.50)$$

donde I_{12} es el flujo de corriente desde la izquierda hacia la derecha y I_{21} la corriente fluyendo desde la derecha hacia la izquierda. Entonces, siguiendo el método dado en (24), podemos escribir I_{12} , como

$$I_{12} = \frac{e}{L} \sum_{\vec{k}} \vec{v} T_{12} f_{12}(E) = \frac{e}{L} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} T_{12} f_{12}(E), \quad (3.51)$$

donde e es la carga del electrón; $\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}}$ es la velocidad de grupo del electrón; T_{12} es la probabilidad de transmisión de los electrones que se desplazan de izquierda a derecha a través de la barrera, y $f(E)$ es la función de Fermi-Dirac. Al transformar una suma en una integral, como en el caso del gas de electrones libres, obtenemos

$$\sum_{\vec{k}} \rightarrow 2 \times \frac{L}{2\pi} \int d\vec{k}, \quad (3.52)$$

reemplazando en la ecuación anterior, tenemos

$$I_{12} = \frac{2e}{h} \int_{E_f + \mu_1}^{E_f + \mu_2} T_{12}(E) f_{12}(E) \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} d\vec{k} = \frac{2e}{h} \int T_{12}(E) f_{12}(E) dE. \quad (3.53)$$

Una ecuación similar puede ser obtenida para I_{21}

$$I_{21} = \frac{2e}{h} \int T_{21}(E) f_{21}(E) dE. \quad (3.54)$$

Para potenciales pequeños y conservación de la corriente en el conductor principal, suponemos que las probabilidades de transmisión son iguales, es decir, $T_{12}(E) = T_{21}(E) = T(E)$. Por lo tanto, reemplazando la ec. 3.53 y ec. 3.54 en la ec. 3.50, obtenemos

$$I_T = \frac{2e}{h} \int_{E_f+\mu_1}^{E_f+\mu_2} T(E)(f_{12} - f_{21})dE, \quad (3.55)$$

como estamos trabajando con pequeñas diferencias de potencial entre las derivaciones izquierda y derecha, podemos realizar una expansión de Taylor para la distribución de Fermi-Dirac $f_{12} - f_{21} \approx -(\mu_1 - \mu_2) \frac{\partial f}{\partial E}$, por lo que la ec. 3.55, resulta

$$I_T = \frac{2e}{h} (\mu_1 - \mu_2) \int_{E_f+\mu_1}^{E_f+\mu_2} T(E) \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) dE, \quad (3.56)$$

y para temperaturas bajas ($T \rightarrow 0$), podemos aproximar $\frac{\partial f}{\partial E} \approx -\delta(E - E_f)$, haciendo uso de las propiedades de la función delta de Dirac

$$\int F(x)\delta(x - a)dx = F(a),$$

luego la conductancia es dada por

$$G = \frac{2e^2}{h} T(E_f). \quad (3.57)$$

Esta es la ecuación de Landauer de la conductancia cuántica, que describe las propiedades del transporte cuántico en un régimen coherente. Para un caso general, podemos decir que T es la suma de las probabilidades de transmisión de dos contactos en diferentes canales, es decir (24)

$$T_{pq} = \sum_{m,n} |t_{mn}^{pq}|^2, \quad (3.58)$$

donde $|t_{mn}^{pq}|^2$ es la probabilidad de que un electrón entre en el dispositivo por el contacto q al canal n y salga del dispositivo por el contacto p y en el canal m .

3.4.2. Cinta finita unida a contactos semi-infinitos

En esta sección, calculamos las funciones de Green de una región finita unida a ambos lados de contactos semi-infinitos. Este cálculo nos da las funciones de Green totales e el sistema a estudiar. Dividimos el sistema en tres partes, como se muestra en la Fig. 3.9. El hamiltoniano total en forma de matriz se puede dividir en submatrices de la siguiente manera (25)

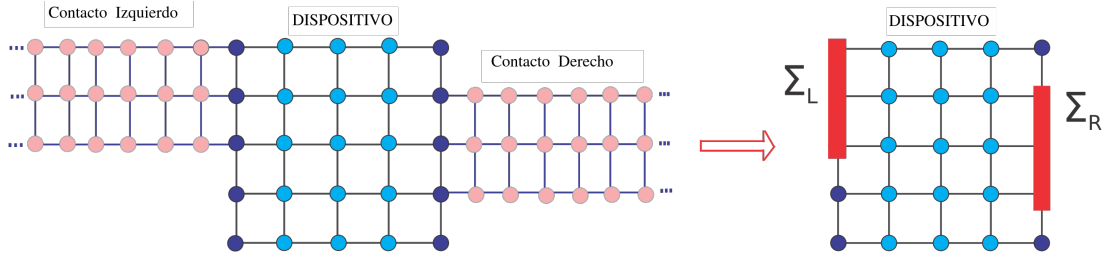


Figura 3.9: Diagrama esquemático del dispositivo central (dispersión) conectado a dos contactos derecho e izquierdo. El acoplamiento entre los conductores y el dispositivo puede tomarse como una interacción efectiva descrita por las autoenergías $\Sigma_{R,L}$ en las interfaces .

$$H = \begin{pmatrix} H_L & V_{LC} & 0 \\ V_{CL} & H_C & V_{CR} \\ 0 & V_{RC} & H_R \end{pmatrix}, \quad (3.59)$$

donde H_C es el hamiltoniano del dispositivo y H_R y H_L son los hamiltonianos de los contactos derecho e izquierdo, respectivamente. V_{LC} y V_{RC} son los acoplamientos entre los contactos y la región del dispositivo y V_{CL} y V_{CR} sus respectivos conjugados hermitianos. El operador de la función de Green está dado por

$$(E - H)\mathcal{G}(E) = 1, \quad (3.60)$$

donde G puede ser dividido dentro de sub-matrices como

$$\mathcal{G} = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_L & \mathcal{G}_{LC} & \mathcal{G}_{LR} \\ \mathcal{G}_{LR} & \mathcal{G}_{CL} & \mathcal{G}_C \\ \mathcal{G}_{RL} & \mathcal{G}_{RC} & \mathcal{G}_R \end{pmatrix}. \quad (3.61)$$

Sustituyendo H y \mathcal{G} en la ec. 3.60 obtenemos (25)

$$\begin{pmatrix} \epsilon - H_L & -V_{LC} & 0 \\ -V_{CL} & E - H_C & -V_{CR} \\ 0 & -V_{RC} & \epsilon - H_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{G}_L & \mathcal{G}_{LC} & \mathcal{G}_{LR} \\ \mathcal{G}_{CL} & \mathcal{G}_C & \mathcal{G}_{CR} \\ \mathcal{G}_{RL} & \mathcal{G}_{RC} & \mathcal{G}_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

y luego, podemos obtener las siguientes relaciones

$$(\epsilon - H_L)\mathcal{G}_{LC} - V_{LC}\mathcal{G}_C = 0, \quad (3.62)$$

$$-V_{LC}\mathcal{G}_{LC} + (\epsilon - H_C)\mathcal{G}_C - V_{CR}\mathcal{G}_{RC} = 1, \quad (3.63)$$

$$-V_{RC}\mathcal{G}_C + (\epsilon - H_R)\mathcal{G}_{RC} = 0. \quad (3.64)$$

Realizando los cálculos, obtenemos $\mathcal{G}_{LC} = \mathcal{G}_L V_{LC} \mathcal{G}_C$ y $\mathcal{G}_{RC} = \mathcal{G}_R V_{RC} \mathcal{G}_C$ y luego tenemos las funciones de Green del dispositivo central

$$\mathcal{G}_C^{r/a}(\epsilon) = [\epsilon - H_C - \Sigma^L(\epsilon) - \Sigma^R(\epsilon)]^{-1}, \quad (3.65)$$

donde $\epsilon = E \pm i\eta$ y

$$\Sigma^L(\epsilon) = V_{CL} g_L(\epsilon) V_{LC}, \quad (3.66)$$

$$\Sigma^R(\epsilon) = V_{CR} g_R(\epsilon) V_{RC}, \quad (3.67)$$

son las autoenergías de los contactos $\Sigma^{L,R}$, que describen el efecto de los contactos sobre el dispositivo. En la Fig. 3.9 mostramos el acoplamiento de energías propias del dispositivo. Estas energías propias se pueden calcular a partir de las funciones de Green de la superficie de los contactos derecho e izquierdo semi-infinitos, $g_L(\epsilon) = (\epsilon - H_L)^{-1}$ (26). Una técnica poderosa para encontrar las energías propias es el método recursivo de la función de Green, que se analiza en detalle en el Apéndice I.2.

La conductancia eléctrica por canal de espín se calcula en el espacio real mediante el formalismo Landauer-Büttiker (27, 25)

$$G_{ss'} = G_o \text{Tr}\{\Gamma_s^L(\epsilon) \mathcal{G}_{C,ss'}^r(\epsilon) \Gamma_{s'}^R(\epsilon) \mathcal{G}_{C,s's}^a(\epsilon)\}, \quad (3.68)$$

donde $G_o = e^2/h$ es la unidad de conductancia cuántica. $\text{Tr}\{\dots\}$ se refiere a la traza del producto del retardado $[\mathcal{G}_{C,ss'}^r(\epsilon)]$ y avanzado $[\mathcal{G}_{C,ss'}^a(\epsilon)]$ Funciones de Green de la parte central así como sus acoplamientos a las derivaciones $\Gamma_s^j(\epsilon)$ ($j = L, R$), siendo E la energía y $\eta \rightarrow 0^+$ es una cantidad infinitesimal real. Para calcular $\mathcal{G}_C^r(\epsilon)$ y $\mathcal{G}_C^a(\epsilon)$, empleamos $\epsilon = E - i\eta$ y $\epsilon = E + i\eta$, respectivamente. La función de Green del dispositivo de dos terminales por espín está dada por

$$\mathcal{G}_{C,ss'}^{r,a}(\epsilon) = [\epsilon - H_{C,ss'} - \Sigma_s^L(\epsilon) - \Sigma_s^R(\epsilon)]^{-1}, \quad (3.69)$$

donde $H_{C,ss'}$ es el hamiltoniano de la parte central por espín, $\Sigma_s^j(\epsilon) = H_{j,C}^\dagger g^j(z) H_{j,C}$ ($j = L, R$) son las autoenergías de espín diagonal, $H_{j,C}$ es la matriz hamiltoniana que describe el acoplamiento entre los parte central y las derivaciones, y g_j son la función de Green de las derivaciones semi-infinitas, que se calculan iterativamente (28, 25). Definimos los acoplamientos a los cables $\Gamma_s^{L,R}$ como

$$\Gamma_s^j(\epsilon) = i \left\{ \Sigma_s^j(\epsilon) - [\Sigma_s^j(\epsilon)]^\dagger \right\} \quad (j = L, R). \quad (3.70)$$

con la ec. 3.68, la conductancia total se puede calcular de la siguiente manera:

$$G = \sum_{ss'} G_{ss'} = G_{\uparrow\downarrow} + G_{\downarrow\uparrow} + G_{\downarrow\downarrow} + G_{\uparrow\uparrow}. \quad (3.71)$$

Donde $G_{ss'}$ nos indica la probabilidad de que el flujo de electrones con un determinado espín $s(\uparrow, \downarrow)$, que entra desde el contacto izquierdo, luego atraviesa la parte central y es colectado con espín $s'(\uparrow, \downarrow)$. Con la función de Green del conductor a la mano, la densidad total de estados (DOS) se puede obtener por

$$\text{DOS}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{ImTr} \left[\sum_{ss'} \mathcal{G}_{C,ss'}^r(\epsilon) \right]. \quad (3.72)$$

Otra cantidad física crucial que se utiliza para caracterizar la corriente es la polarización de espín, definida por (29)

$$P_\alpha = \frac{I_{j,\alpha}^\uparrow - I_{j,\alpha}^\downarrow}{I_{j,\alpha}^\uparrow + I_{j,\alpha}^\downarrow}, \quad (3.73)$$

donde $I_{j,\alpha}^\uparrow$ y $I_{j,\alpha}^\downarrow$ representan las corrientes que fluyen a través del conductor j elegido a lo largo de la dirección α con componentes de espín hacia arriba (espín *up*) y de espín hacia abajo (espín *down*), respectivamente. En términos de la función de Green, esta ecuación se puede escribir como (30, 31, 32)

$$P_\alpha = \frac{G_0 \text{Tr}[\sigma_\alpha \Gamma_s^L(\epsilon) \mathcal{G}_{C,ss'}^r(\epsilon) \Gamma_{s'}^R(\epsilon) \mathcal{G}_{C,s's}^a(\epsilon)]}{G}, \quad (3.74)$$

donde σ_α son las matrices de Pauli correspondientes con $\alpha = x, y, z$. Las proyecciones de polarización de espín a lo largo de las direcciones x, y y z , es decir, P_x, P_y y P_z son las paralelas, transversales y perpendiculares, respectivamente. Claramente, la polarización total etiquetada por P_t se puede cuantificar como

$$P_t = \sqrt{P_x^2 + P_y^2 + P_z^2}. \quad (3.75)$$

Es claro de la definición anterior que la polarización total debe obedecer a la conservación actual, con $P_t \leq 1$.

Otra cantidad no menos importante es la densidad local de estados dada por

$$\text{LDOS}(E) = -(1/\pi) \text{Im}[\mathcal{G}_c^r(\epsilon)_{ii}], \quad (3.76)$$

3.5. ACOPLAMIENTO ESPÍN-ÓRBITA

La interacción espín-órbita es un fenómeno relativista, que entra como término de corrección de energía en la ecuación de Schrödinger. Esta interacción es responsable por la división de niveles de energía que conducen a la observación de brechas en moléculas y átomos. La interacción espín-órbita ocurre porque el electrón siente un campo eléctrico debido a al núcleo atómico, lo que en consecuencia hace que este electrón experimente un campo magnético efectivo, que se acopla al momento magnético del electrón (33). La interacción espín-órbita atómica viene dada por

$$H_{so} = \xi(r)\vec{L}\cdot\vec{S}, \quad (3.77)$$

donde el término $\xi(r) = \frac{1}{2m^2c^2r} \frac{dV}{dr}$ es el parámetro de acoplamiento espin-órbita, m es la masa del electrón, c es la velocidad de la luz, \vec{L} es el momento angular del electrón y \vec{S} es el momento de espín. Sabemos que el potencial de Coulomb es dado por

$$V = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (3.78)$$

con Z es el número atómico y ϵ_0 la constante dieléctrica, de forma que el parámetro de acoplamiento $\xi(r)$, resulta

$$\xi(r) = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 m^2 c^2} \frac{1}{r^3} \quad (3.79)$$

Una consecuencia notable de la última ecuación, es que podemos definir la constante de estructura fina como

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \sim \frac{1}{137} \quad (3.80)$$

donde α es una constante que caracteriza la fuerza de la interacción electromagnética, además es adimensional, es decir que es independiente de cualquier sistema de unidades que se utilice. Combinando la última ecuación con la ec. 3.79 y poniendo el resultado en la ec.3.77, obtenemos

$$H_{so} = \frac{Z\alpha\hbar}{2m^2cr^3} \vec{L}\cdot\vec{S} \quad (3.81)$$

por otro lado, conocemos de la mecánica cuántica la relación

$$J^2 = L^2 + 2\vec{L}\cdot\vec{S} + S^2 \quad (3.82)$$

y con un poco de álgebra, se tiene

$$\vec{L}\cdot\vec{S} = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2) \quad (3.83)$$

de modo que podemos escribir H_{so} como

$$H_{so} = Z\alpha \frac{\hbar}{4m^2c} \frac{J^2 - L^2 - S^2}{r^3} \quad (3.84)$$

Calculando el valor esperado en la última ecuación, se obtiene

$$\begin{aligned}\langle H_{so} \rangle &= \int_0^\infty \Psi_{n,l,j,m_j}^* H_{so} \Psi_{n,l,j,m_j} dr^3 \\ &= Z\alpha \frac{\hbar^3}{4m^2c} [j(j+1) - l(l+1) - 3/4] \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle\end{aligned}\quad (3.85)$$

donde fue usado que $s = 1/2$, que representa el espín del electrón y el hecho que

$$J^2\Psi = j(j+1)\hbar^2\Psi, \quad L^2\Psi = l(l+1)\hbar^2\Psi, \quad S^2\Psi = \frac{3}{4}\hbar^2\Psi \quad (3.86)$$

Por otro lado, si $l \neq 0$ tenemos que $j = l \pm 1/2$ lo que lleva a dividir cada nivel de energía en otros dos, por lo que el valor esperado de $\frac{1}{r^3}$ viene dado por

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \left(\frac{Z\alpha mc}{\hbar n} \right)^3 \frac{2}{l(l+1)(2l+1)} \quad (3.87)$$

Reemplazando esta expresión en la ec. 3.85 y recordando que para átomos hidrogenoides $E_0 = \frac{\alpha^2 mc^2}{2} = 13,6eV$, tenemos

$$\langle H_{so} \rangle = \xi_{so} = \frac{Z^4}{n^3} \frac{j(j+1) - l(l+1) - 3/4}{l(l+1)(2l+1)} \alpha^2 E_0 \quad (3.88)$$

de esta última ecuación se puede observar que la magnitud de ξ_{so} aumenta con el número atómico Z , y todavía se puede observar que existe una dependencia con el número principal n .

3.5.1. Acoplamiento Espín-Órbita Rashba

En la sección anterior estudiamos la interacción espín-órbita, que puede mostrar efectos importantes en la estructura de los sólidos. En este apartado estudiaremos la interacción espín-órbita del tipo Rashba, que surge cuando el plano de del sistema (grafeno o DMT) se encuentra sobre un sustrato o un campo eléctrico perpendicular al plano. En el presente trabajo solo consideraremos efectos de campo eléctrico, ya que esta interacción debida a un sustrato tiene una mayor complejidad de estimar. Usando las reglas del producto mixto en la ec. 3.77 y recordando que $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, se da la interacción EOR por

$$H_R = \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \vec{E} \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{p}) \quad (3.89)$$

donde $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ son las matrices de Pauli, $\vec{E} = E_0\vec{Z}$ es el campo en la dirección \vec{Z} , y \vec{p} es el momento lineal del electrón. Siguiendo el procedimiento dado por Martino (34), y usando el formalismo de segunda cuantización, podemos expresar la ecuación anterior como

$$H_R = i \frac{\lambda_R}{a_{Si}} \sum_{\langle i,j \rangle_{\alpha\beta}} c_{i\alpha}^\dagger (\vec{\sigma} \cdot \vec{u}_{ij})_{\alpha\beta} c_{j\beta} \quad (3.90)$$

donde λ_R es la constante de interacción EOR. El vector $\vec{u}_{i,j} = \vec{\delta}_{i,j} \times \vec{Z}$, donde $\vec{\delta}_{i,j}$ son los vectores de los primeros vecinos sobre la suma $\langle i, j \rangle$ de un sitio dado, $c_{i\alpha}^\dagger (c_{j,\beta})$ son la creación y operadores de destrucción con orientación de espín $\alpha(\beta)$ en lugares $i(j)$.

3.5.2. Acoplamiento Espín-Órbita Intrínseco

Otra interacción importante presente en la red hexagonal es la interacción espín-órbita intrínseco (EOI), esta interacción fue estudiada por primera vez por (35) y utilizada en varios trabajos para describir el efecto Hall Cuántico de espín (36, 37), además, esta segunda interacción de cuantificación se puede escribir como

$$H_{so} = i \frac{\lambda_{so}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle_{\alpha\beta}} \nu_{ij} c_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^z c_{j\beta} \quad (3.91)$$

donde λ_{so} es la constante de espín-órbita intrínseco, $\nu_{ij} = \frac{\vec{\delta}_i \times \vec{\delta}_j}{|\vec{\delta}_i \times \vec{\delta}_j|}$, con $\vec{\delta}_i$ y $\vec{\delta}_j$ las dos ligaciones más próximas conectando el vecino siguiente y la suma es tomada sobre los pares $\langle\langle ij \rangle\rangle$ de los segundos vecinos de un sitio.

3.6. CONCEPTUAL

Los nuevos constructos fundamentados en el presente proyecto de investigación son:

- Hacer un comparativo entre diversos sistemas bidimensionales, analizar las estructuras de banda y densidad de estados en ambos materiales.
- Analizar el comportamiento de la conductancia y la polarización en nanocintas de grafeno y dicalcogenuros de metales de transición, así como analizar los posibles cambios en la presencia de espín-órbita en ambos sistemas.

3.7. DEFINICIÓN DE TÉRMINOS BÁSICOS

En lo que sigue se mencionarán algunas definiciones importantes que servirán de fundamento para la investigación del presente proyecto.

- **Tight Binding**, en español: enlace fuerte. Es el método que será empleado en el presente proyecto para el cálculo de las propiedades a estudiar. El método consiste en emplear la energía de interacción

entre átomos más cercanos, comumente llamados de vecinos, así podemos usar una aproximación a primera orden (primeros vecinos), a segunda orden (segundos vecinos) y así sucesivamente.

- **Hopping**, en español : salto. Es la energía asociada en las interacciones entre átomos vecinos, normalmente es denotada por la letra **t**. Estrictamente hablando es la energía entre un orbital inferior a otro superior (de los átomos). En la referencia (38) podemos encontrar varios tipos de *hoppings*.
- **Nanocinta**, las nanocintas son cortes en hojas de un determinado material a lo largo de una cierta dirección, resultando en bordes bien definidos. La presencia de bordes en las nanocintas presenta un fenómeno interesante en el comportamiento de los electrones. Los bordes más comunes son las nanocintas con borde *zigzag* y *armchair*.
- **electrón**, el electrón, comúnmente representado por el símbolo e^- , es una partícula subatómica con una carga eléctrica elemental negativa.

4 HIPÓTESIS Y VARIABLES

4.1. HIPÓTESIS

4.1.1. General

Si las propiedades electrónicas y de transporte en nanocintas de grafeno y dicalcogenuros de metales de transición son metálicas entonces la polarización en ambos materiales presenta diferente comportamiento.

4.1.2. Específicos

- El parámetro de *hopping* en las nanocintas de grafeno, tomaría un orbital por sitio debido a su naturaleza planar.
- Las nanocintas de dicalcogenuros de metales de transición, utilizaría terminos de *hopping* debido a su carácter no-planar.
- Las propiedades de transporte G y P en ambos materiales depende del valor del espín-órbita de cada material.

4.2. DEFINICIÓN CONCEPTUAL DE VARIABLES

- G : término asociado a la conductancia electrónica, que indica el paso de corriente en cierto intervalo de energía.
- P : término de Polarización, basicamente es un vector, el cual indica si un material presenta mayor cantidad de contribución de espín *up* (arriba) o *down* (abajo).

4.2.1. Operacionalización de variable

Variable	Dimen- sio- nes	Indicadores	Índice	Método	Técnica
Dependiente Con- ductancia G	Variación en dependencia del valor de espín-órbita	Funciones paso	$0 \leq G \leq 10$	Teórico	Computacional
Independiente Polarización P	Cantidad de portadores polarizados o alineados con espín hacia arriba o hacia abajo	– Vector con componentes x , y , z .	Cantidad de portadores polarizados o alineados en una cierta dirección de espín.	Teórico	Computacional

Cuadro 4.1: Operacionalización de variables

5 DISEÑO METODOLÓGICO

5.1. TIPO Y DISEÑO DE INVESTIGACIÓN

El presente trabajo de investigación de tesis es un estudio del tipo básico desarrollado dentro del área de la física teórica y computacional. Específicamente, en torno al estudio de sistemas bidimensionales. Los procedimientos a ser usados son los analíticos combinados con técnicas numérico-computacionales que servirán de herramientas para los análisis de propiedades de la materia tales como electrónicas y de transportes, de los cuales se obtendrán resultados y conclusiones.

5.2. MÉTODO DE INVESTIGACIÓN

. Emplear el método *tight binding* o también llamado de enlace fuerte, el cual es un enfoque para el cálculo de la estructura de banda electrónica utilizando un conjunto aproximado de funciones de onda basadas en la superposición de funciones de onda para átomos aislados ubicados en cada sitio atómico.

. Introducir los parámetros de espín-órbita al cálculo de la conductancia, la cuál es determinada por el cálculo numérico de la función de Green del conductor atada a los contactos semi-inifinitos.

. Usando la Función de Green del conductor, usaremos la fórmula de la polarización en las tres direcciones. Primero hallaremos para el caso de nanocintas de grafeno y en seguida las nanocintas de DMT de forma numérica. Para el cálculo de las diferentes propiedades se usará el lenguaje de programación Fortran 90.

5.3. POBLACIÓN Y MUESTRA

La presente investigación es de carácter teórica por lo tanto no se tomará en cuenta población ni muestra

5.4. LUGAR DE ESTUDIO

Por ser el trabajo de tipo fenomenológico, el lugar de estudio no necesitará de un laboratorio ni de salidas al campo, motivo por el cual será realizado en la Facultad de Ciencias Naturales y Matemática de la Universidad Nacional del Callao y en el Instituto de Física de la Universidade de Brasília.

5.5. TÉCNICAS E INSTRUMENTOS PARA LA RECOLECCIÓN DE LA INFORMACIÓN

Para la ejecución de este proyecto de investigación se emplearán técnicas analíticas como el uso de álgebra y cálculo integral, además técnicas computacionales donde se usaran simulaciones numéricas escritas en el lenguaje de programación de alto nivel, Fortran. Los instrumentos para la recolección de la información serán, lápiz, papel y un computador, debido a la complejidad del cálculo numérico también se hará uso de un cluster.

5.6. ANÁLISIS Y PROCESAMIENTO DE DATOS

El presente proyecto de investigación se remonta en realizar un análisis minucioso de las propiedades electrónicas y de transporte entre las nanocintas de grafeno y dicalcogenuros de metales de transición. Para el caso de las nanocintas de grafeno construiremos una matriz de forma analítica y haremos uso del programa Fortran para su respectiva diagonalización para encontrar los autovalores y autovectores, para ello usaremos una computadora o laptop que tenga instalado el sistema operacional Linux. Con eso en mano, podremos calcular la estructura de banda y la conductancia en las estructuras propuestas.

Para el caso de nanocintas de dicalcogenuros de metales de transición, tendremos que hacer un complejo trabajo analítico para construir la matriz, esta involucra más de un orbital por sitio, por lo tanto para su respectiva diagonalización tendremos que hacer uso de un cluster que nos ayudará a optimizar tiempo.

6 RESULTADOS

En esta parte de la tesis presentamos los resultados tanto para el caso de nanocintas *zigzag* de grafeno como de MoS_2

6.1. PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y DE TRANSPORTE EN NANOCINTAS ZIG-ZAG DE GRAFENO

En esta sección, presentaremos el efecto del acoplamiento espín-órbita sobre la estructura de banda electrónica de la nanocinta *zigzag* de grafeno (NZGR), para luego analizar las propiedades de transporte en estas nanocintas

6.1.1. Efecto del acoplamiento espín-órbita Rashba en las nanocintas *zigzag* de grafeno

Ahora podemos analizar el efecto de esta interacción EOR en las NZGR. Haciendo uso del método estudiado en la sección 3.2.2 podemos obtener la estructura de bandas, de esta forma, podemos describir el efecto Rashba en las NZGR mostrado en la Fig. 3.1, así, para usar la Ec. 3.90, es necesario conocer los primeros vecinos de un determinado sitio, que pertenece a la celda m y localizado en una cierta línea n , con lo cual tenemos

$$\vec{\delta}_{m,m+1/2} = \frac{\sqrt{3}}{2}a \left(\hat{i} + \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{j} \right), \quad \vec{\delta}_{m,m-1/2} = \frac{\sqrt{3}}{2}a \left(-\hat{i} + \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{j} \right) \quad (6.1)$$

$$\vec{\delta}_{n,n-1} = -a\hat{j}, \quad (6.2)$$

de forma que los vectores $\vec{u}_{i,j}$ son

$$\vec{u}_{m(m+1/2)} = \lambda_R \left(\frac{1}{2}\sigma_x^{\alpha,\beta} - \frac{\sqrt{3}}{2}\sigma_y^{\alpha,\beta} \right), \quad \vec{u}_{m(m-1/2)} = \lambda_R \left(\frac{1}{2}\sigma_x^{\alpha,\beta} + \frac{\sqrt{3}}{2}\sigma_y^{\alpha,\beta} \right) \quad (6.3)$$

$$\vec{u}_{n,n+1} = -\lambda_R\sigma_x^{\alpha,\beta} \quad (6.4)$$

asi, la función 3.16 será escrita como

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{m,n}^{M,N} e^{i\vec{k}\vec{R}_m} \{a(\vec{k}, n, \uparrow)|a, m, n, \uparrow\rangle + b(\vec{k}, n, \uparrow)|b, m, n, \uparrow\rangle + a(\vec{k}, n, \downarrow)|a, m, n, \downarrow\rangle + b(\vec{k}, n, \downarrow)|b, m, n, \downarrow\rangle\} \quad (6.5)$$

y usando el método dado en la sección 3.2.2 para *spin-up*, tenemos

$$Ea(\vec{k}, n, \uparrow) = -i\lambda_R \left\{ b(\vec{k}, n, \downarrow)2 \cos\left(\frac{a_z}{2} - \frac{2\pi}{3}\right) + b(\vec{k}, n-1, \downarrow) \right\} \quad (6.6)$$

$$Eb(\vec{k}, n, \uparrow) = i\lambda_R \left\{ a(\vec{k}, n, \downarrow)2 \cos\left(\frac{a_z}{2} + \frac{2\pi}{3}\right) + b(\vec{k}, n+1, \downarrow) \right\} \quad (6.7)$$

y para *spin-down* se tiene

$$Ea(\vec{k}, n, \downarrow) = -i\lambda_R \left\{ b(\vec{k}, n, \uparrow)2 \cos\left(\frac{a_z}{2} + \frac{2\pi}{3}\right) + a(\vec{k}, n-1, \uparrow) \right\} \quad (6.8)$$

$$Eb(\vec{k}, n, \downarrow) = i\lambda_R \left\{ a(\vec{k}, n, \uparrow)2 \cos\left(\frac{a_z}{2} - \frac{2\pi}{3}\right) + a(\vec{k}, n+1, \uparrow) \right\} \quad (6.9)$$

donde $a = \sqrt{3}a_z$. En la Fig. 6.1 es mostrado el efecto de la interacción EOR en una NZGR, esta interacción quiebra la degenerescencia del espín del electrón, pero no abre *gap* entre las bandas de valencia y conducción, y como consecuencia la banda plana continua y el carácter metálico no es alterado.

6.1.2. Efecto del acoplamiento espín-órbita intrínseco en nanocintas *zigzag* de grafeno

Ayudados de la ec. 3.1 podemos obtener los v_{ij} para las NZGR, así para electrones con *spin-up*, tenemos

$$Ea(\vec{k}, n, \uparrow) = 2\lambda_{so}a^2 \left\{ \text{sen}\left(\frac{k_x a_z}{2}\right) [a(\vec{k}, n-1, \uparrow) + a(\vec{k}, n+1, \uparrow)] - \text{sen}(k_x a_z)a(\vec{k}, n, \uparrow) \right\} \quad (6.10)$$

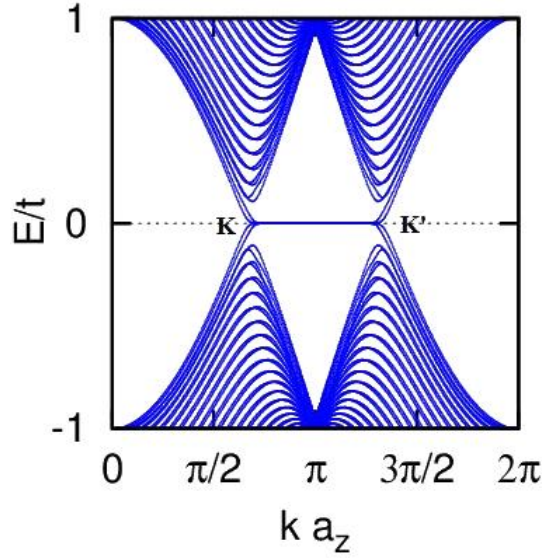


Figura 6.1: Estructura de banda de una 40-NZGR con acoplamiento EOR, para $\lambda_R = 0,05eV$, donde se puede observar claramente la quiebra de degenerescencia de espín.

$$Eb(\vec{k}, n, \uparrow) = -2\lambda_{so}a^2 \left\{ \text{sen} \left(\frac{k_x a_z}{2} \right) [b(\vec{k}, n-1, \uparrow) + b(\vec{k}, n+1, \uparrow)] - \text{sen}(k_x a_z) b(\vec{k}, n, \uparrow) \right\} \quad (6.11)$$

y para electrones con *spin-down*, se tiene

$$Ea(\vec{k}, n, \downarrow) = 2\lambda_{so}a^2 \left\{ \text{sen} \left(\frac{k_x a_z}{2} \right) [a(\vec{k}, n-1, \downarrow) + a(\vec{k}, n+1, \downarrow)] - \text{sen}(k_x a_z) a(\vec{k}, n, \downarrow) \right\} \quad (6.12)$$

$$Eb(\vec{k}, n, \downarrow) = -2\lambda_{so}a^2 \left\{ \text{sen} \left(\frac{k_x a_z}{2} \right) [b(\vec{k}, n-1, \downarrow) + b(\vec{k}, n+1, \downarrow)] - \text{sen}(k_x a_z) b(\vec{k}, n, \downarrow) \right\} \quad (6.13)$$

En la Fig. 6.2 (a), se muestra la estructura de banda de una NZGR, sin acoplamiento EOI, esta estructura se compone de estados de borde (banda plana que une los puntos de alta simetría K y K') y estados *bulk*. Cada estado es cuatro veces degenerado (degeneración de espín de dos electrones y degeneración de espín de dos valles o comúnmente llamado pseudoespín). En la Fig. 6.2 (b) se muestra el efecto del acoplamiento EOI, esta interacción abre *gap* en los bordes K y K' rompiendo la degeneración del pseudo-spin, lo que lleva a que ahora cada estado solo obtiene una doble degeneración de Kramer debido al espín del electrón que no se rompió. Por otro lado, en el punto $K a_z = \pi$ el comportamiento es metálico, esta configuración

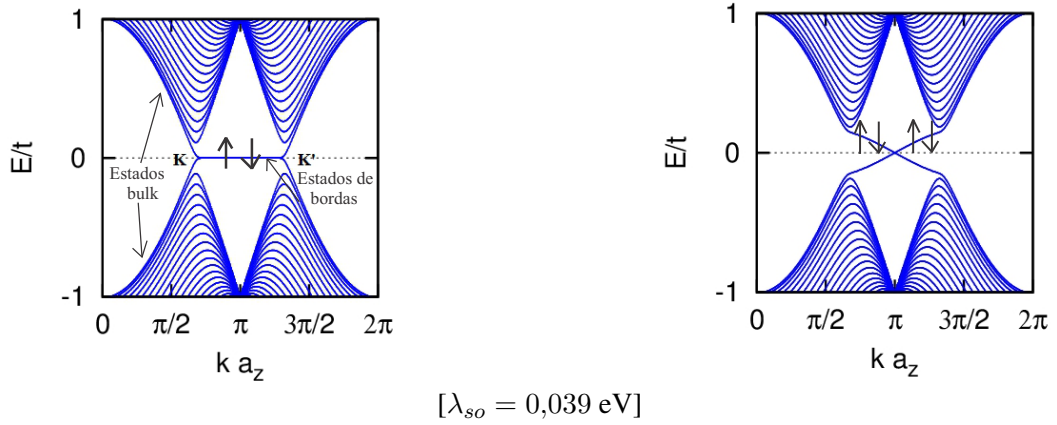


Figura 6.2: Estructura de bandas de una NZGR (a) con $\lambda_{so} = 0,0eV$ (b) $\lambda_{so} = 0,039eV$. Observe que la interacción EOI no abre *gap* en la parte central, pero abre *gap* en los puntos K y K' .

aislante en los bordes y metálica en el centro es una aplicación a futuros dispositivos conocidos como aislantes topológicos.

6.1.3. Propiedades de transporte en la ausencia de espín-órbita en nanocintas *zigzag* de grafeno

Para el caso de las nanocintas en *zigzag*, la dispersión de electrones muestra bandas planas en el nivel de Fermi, lo que contribuye a un pico muy pronunciado en la densidad de estados en $E_f = 0$, como se muestra en la Fig. 6.3 (a) donde hemos elegido un ancho de $N = 8$. Al disminuir o aumentar la energía del nivel de Fermi, diferentes sub-bandas comienzan a contribuir al transporte cuántico, de modo que la conductancia aumenta proporcionalmente con el número de canales disponibles, como podemos ver en la Fig. 6.3 (b)

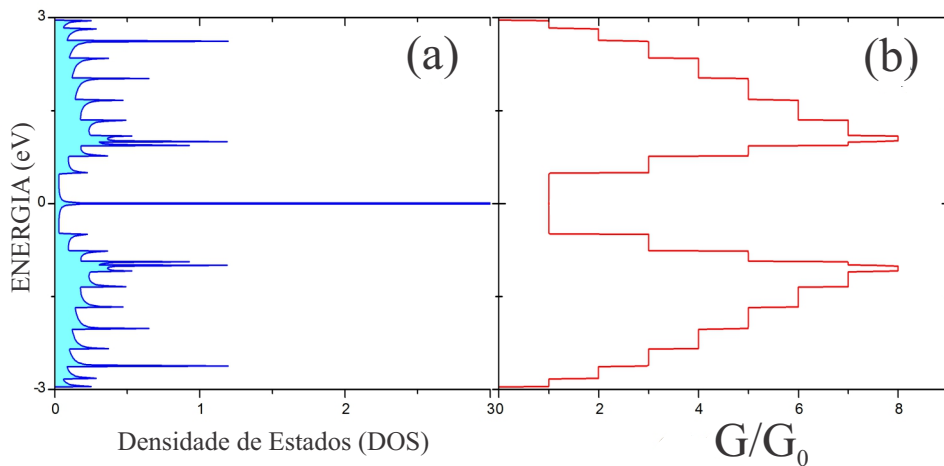


Figura 6.3: (a) Densidad de estados de una nanocinta *zigzag* de grafeno (b) Conductancia eléctrica de una 8-NZGR.

6.1.4. Propiedades de transporte en la presencia de espín-órbita en nanocintas *zigzag* de grafeno

En esta parte de la tesis, presentaremos los efectos producidos por el efecto de los acoplamientos EOI y EOR sobre las propiedades de transporte en las NZGR.

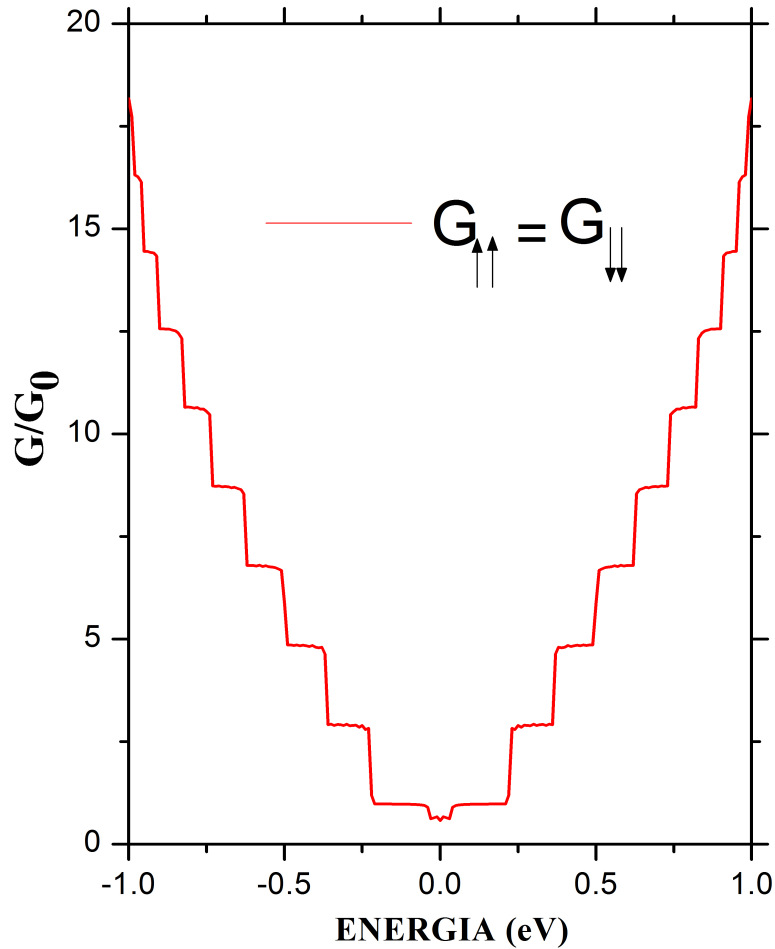


Figura 6.4: Conductancia para una 20-NZGR y $\lambda_{so} = 0,039t$.

En la Fig. 6.4, se muestra la conductancia para una NZGR de ancho $N = 20$, sometida al efecto de EOI, esta interacción hace con que la conductancia en la región de dispersión (región central), se muestre pequeñas oscilaciones. Este fenómeno puede ser entendido como o el hecho que el electrón al pasar de los contactos a la región central interactúa con una barrera de potencial justamente generada por la región central, haciendo que la conductancia G/G_0 sea menor, debido a que el coeficiente de transmisión disminuye.

En la Fig. 6.5 se muestra la conductancia de una nanocinta *zigzag* de ancho $N = 20$, bajo la interacción del EOR, se puede ver que se conserva la simetría electrón-hueco con respecto al nivel de Fermi. Esta interacción hace que el electrón atraviese la barrera de potencial del dispositivo sufriendo un *flip*, esto quiere decir que si el electrón sale de los contactos con *spin-up* (*spin-down*), pasa al conductor con *spin-down* (*spin-up*).

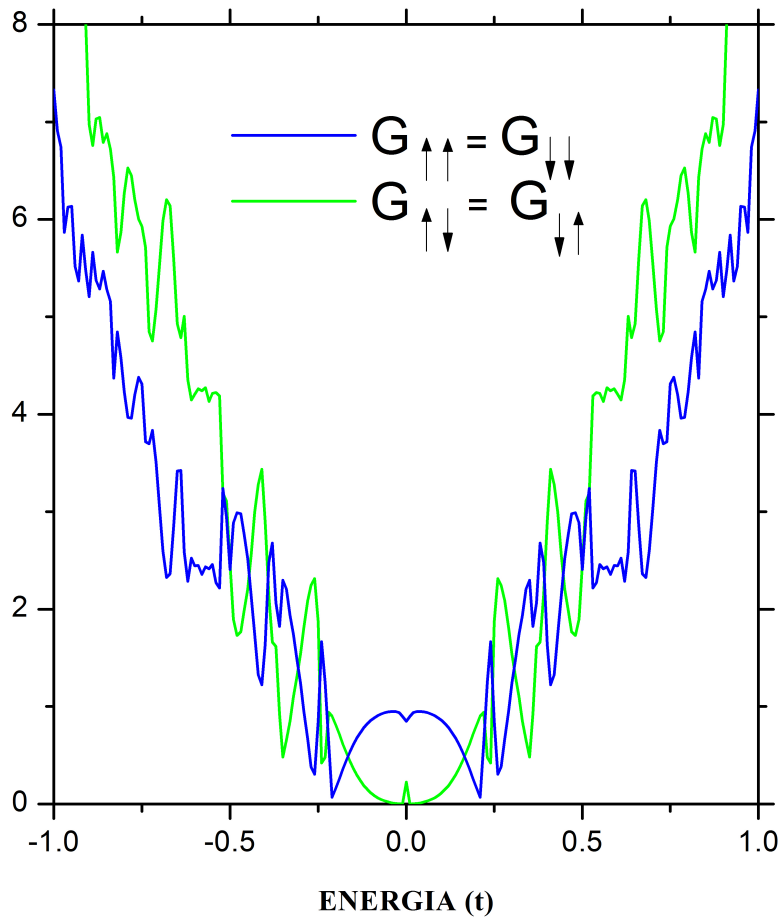


Figura 6.5: Conductancia electrónica para 20-NZGR con acoplamiento EOR.

Además, como se puede ver en la Fig. 6.5 la conductancia para electrones con *spin-up* (*spin-down*) con respecto al nivel de Fermi es máxima, lo que corresponde a un mínimo de conductancia después de que cambia el espín del electrón. Para el caso de la nanocinta en zigzag, la situación es diferente, donde una conductancia electrónica máxima con *spin-up* (*spin-down*) corresponde a una conductancia mínima cuando el espín del electrón cambia con respecto a Fermi. nivel ($E_f = 0$).

El efecto combinado del EOI y el EOR, se muestra en la Fig. 6.6, para la nanocinta zigzag de ancho $N=20$. Como puede verse, la simetría electrón-hueco con respecto al nivel de Fermi se ha roto. Un hecho interesante es que cerca del nivel de Fermi en la nanocinta, la conductancia *up-up*(*down-down*) muestra un mínimo, que coincide con un máximo de la conductancia *up-down* (*down-up*), además se observa que la conductancia *up-up*(*down-down*) cerca del nivel de Fermi se vuelve casi constante hasta un punto, después del cual comienza a subir (color azul), de manera similar la conductancia *up-down*(*down-up*) es casi constante hasta un punto, a partir del cual comienza a descender (color verde).

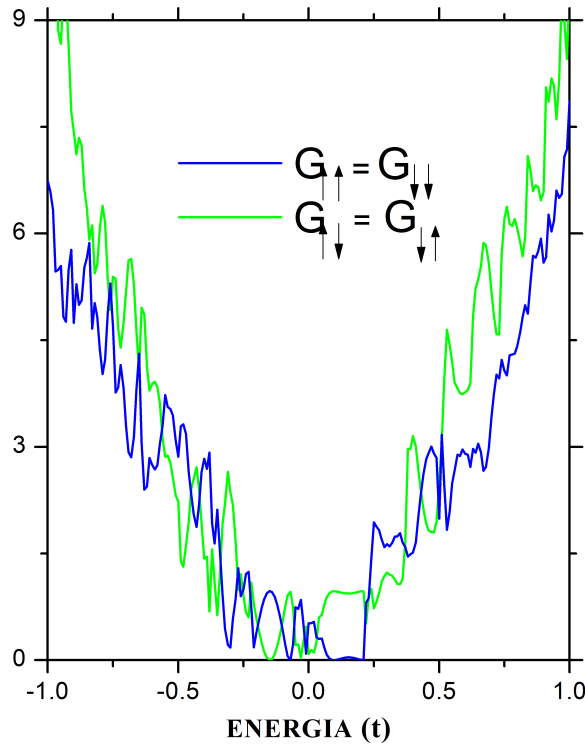


Figura 6.6: Conductancia para una 20-NZGR con efecto combinado de acoplamiento EOI y EOR, $\lambda_{so} = 0,039t$ e $\lambda_R = 0,05t$.

6.2. PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y DE TRANSPORTE EN NANOCINTAS ZIG-ZAG DE MoS_2

En esta sección, primero presentamos las estructuras de banda electrónica de la nanocinta *zigzag* de MoS_2 , y luego analizamos el efecto producido por el acoplamiento EOR. Finalmente, discutimos las propiedades de transporte, enfocándonos en la anisotropía de la polarización de espín. Vale la pena recordar que aunque nos enfocamos principalmente en las nanocintas en *zigzag* de MoS_2 angostas, el comportamiento de la corriente de borde también es aplicable a nanocintas más anchas debido al papel central de los estados de borde para esta terminación de borde (39).

6.2.1. Estados de borda en una nanocinta *zigzag* de MoS_2

Ahora estamos listos para centrar nuestra atención en los estados de borde de las nanocintas en *zigzag* de TMDC prístinas, obtenidas al resolver Ec. 3.39 en ausencia del acoplamiento espín-órbita Rashba. En la Fig. 6.7(a), mostramos la estructura de banda de una nanocinta *zigzag* de MoS_2 que incluye solo el término de EOI. El ancho (W) de la cinta se fija en $N=10$.

Antes de discutir la estructura de la banda electrónica en detalle (como se muestra a continuación en la Fig. 6.7), primero echamos un vistazo a la densidad de estados (DOS), especialmente en el rango de energía correspondiente a los estados de borde, ver Fig. 6.7(b). Las singularidades de van Hove se ven como picos agudos en cada subbanda de energía, básicamente esto se debe al carácter 1D de estos sistemas. Debido al

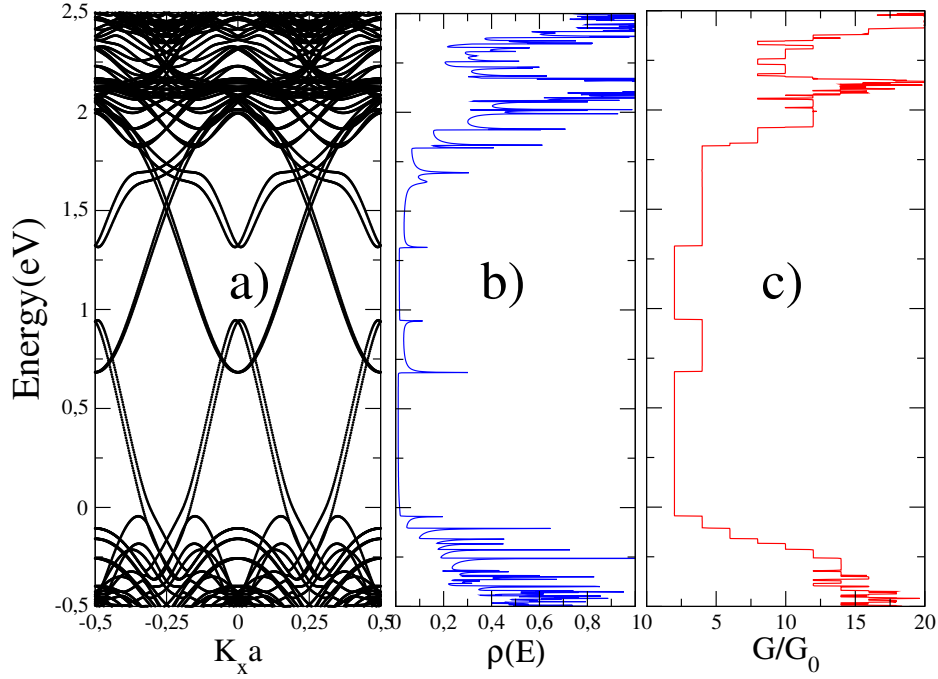


Figura 6.7: (a) Estructura de banda electrónica, (b) densidad de estados, y (c) conductancia cuántica total para una nanocinta *zigzag* de MoS_2 . El ancho de la cinta de MoS_2 a ser escogida a ser $N = 10$.

pico de DOS que proviene de los estados de borde, se espera un comportamiento metálico y los canales de conductancia correspondientes. Mostramos la conductancia de espín total para la nanocinta MoS_2 en la Fig. 6.7(c). Podemos ver que la conductancia aumenta en pasos de $2G_0$: se abren más canales conductores al aumentar la energía. La conductancia muestra mesetas y estas aumentan con el número de subbandas que ocurren por debajo de la energía de Fermi (40).

6.2.2. Efecto del acoplamiento espín-órbita Rashba sobre los estados de borde de nanocintas *zigzag* de MoS_2

Aquí nos enfocamos en la estructura de banda de la nanocinta de MoS_2 . Para apreciar mejor el efecto del EOR externo, primero analizamos las cintas solo en presencia del espín SOC intrínseco. En la Fig. 6.8 se ve la ampliación de las bandas alrededor de las energías de los estados de borde para MoS_2 (a). Sorprendentemente, se encuentra que las ramas de los estados de borde de espín hacia arriba y hacia abajo se desplazan con respecto al punto en $k_x = 0$ incluso sin la inclusión de EOR externo. En otras palabras, el acoplamiento espín-órbita intrínseco por sí solo desplaza la rama giratoria hacia una dirección en el espacio k y la rama descendente en la dirección opuesta, lo que lleva al cruce de las bandas con espín opuesto en $k_x = 0$ (41). Esto contrasta con las monocapas 2D (*bulk*), para las cuales las bandas tienen un espín degenerado cerca del punto Γ (1).

Es importante señalar que el cambio de espín de borde bandas en nanocintas sin EOR externo es similar a la que ocurre en monocapas 2D *bulk* con EOR. Sin embargo, las propiedades de espín son fundamentalmente distintas. En el caso 2D a granel, hay una mezcla de espín considerable alrededor del punto Γ , mientras que para los ZNR el espín sigue siendo un buen número cuántico. Además, notamos que para un

nivel de Fermi dado, los MoS_2 ZNR se comportan como una fase de Hall de valle cuántico (QVH) (1, 42). Esto se deduce de que los modos de borde metálico en las nanocintas TMDC en zigzag están bloqueados en valle, mientras que el borde semiconductor. Los modos de las nanocintas TMDC de sillón se mezclan en valle y, por lo tanto, hacen que el grado de libertad del valle ya no sea un buen número cuántico. como resultado del bloqueo de spin-valley.

En las Figs. 6.8(b), mostramos la estructura de banda incluyendo la interacción espín-órbita Rashba con $\lambda_R = 0,05$ eV, para la nanocinta de MoS_2 . En contraste con la monocapa 2D de MoS_2 donde el espín es degenerado en el punto Γ , aquí podemos ver un estado de espín que se divide incluso en $k_x = 0$, lo que genera minibrechas. Esta característica puede crear un régimen helicoidal, es decir, la orientación de las ramas que giran hacia arriba y hacia abajo puede cambiar al cruzar este punto. Esta peculiaridad es esencial para generar polarización de espín de corrientes de carga en mediciones de transporte cuántico. Estas minibrechas son necesarios para los estados de superconductividad topológica (43).

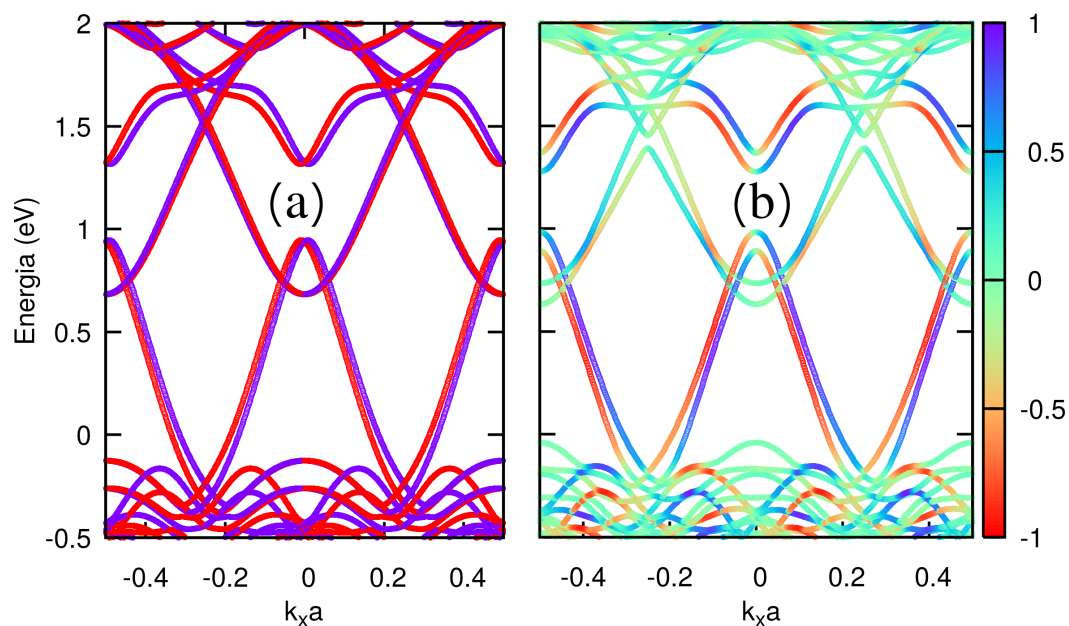


Figura 6.8: (a) Estructura de banda electrónica con $\lambda_R = 0$, (b) Estructura de banda electrónica considerando $\lambda_R = 0,05$ eV. $N= 10$.

6.2.3. Efecto del acoplamiento espín-órbita Rashba sobre la conductancia cuántica de espín y polarización de espín

En nuestros cálculos, consideramos que la región central y dos conductores semi-infinitos están hechos de la misma nanocinta de MoS_2 , como se muestra en la Fig. 6.9. En consecuencia, incluimos el espín-órbita intrínseco en todo el sistema (tanto la región central como los dos conductores), mientras que el espín-órbita Rashba solo en la región central

La energía de Fermi se controla mediante la aplicación de un voltaje de puerta. Como se analizó anteriormente, la simetría partícula-hueco en estas estructuras no se conserva porque las bandas de conducción y valencia están dominadas principalmente por $|d_{z^2}\rangle$ y $|d_{x^2-y^2}\rangle \pm i|d_{xy}\rangle$ orbitales del átomo del metal

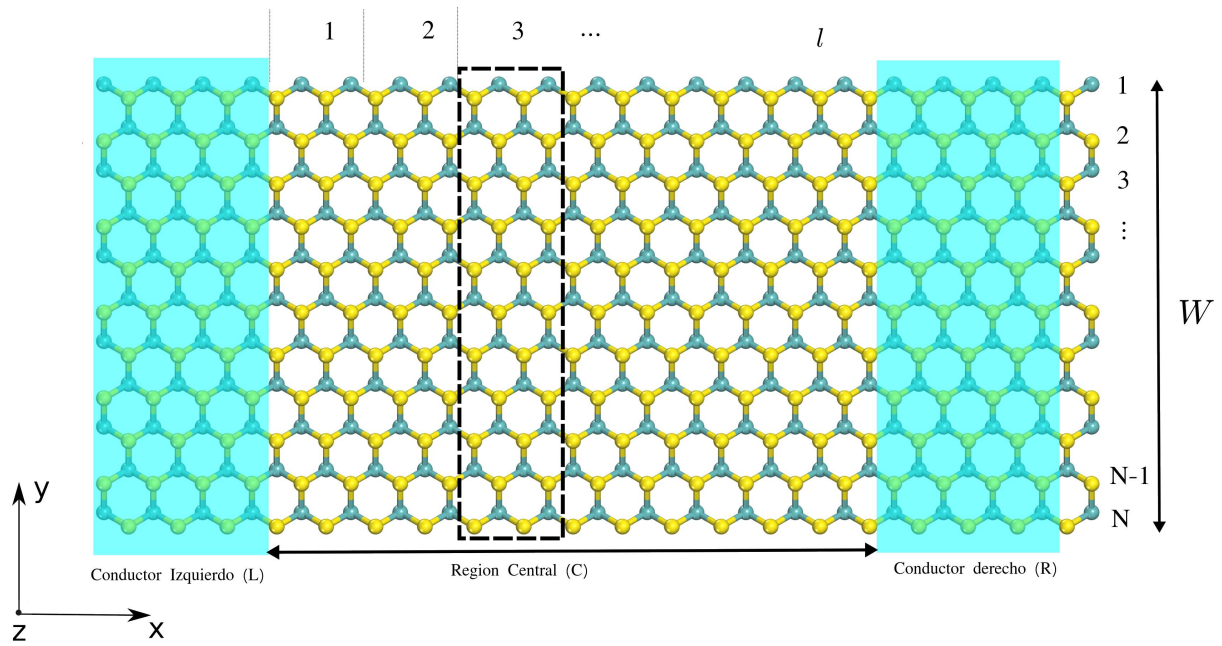


Figura 6.9: Vista superior del dispositivo de nanocintas TMDC en zigzag, compuesto por una región central (C) conectada a los conductores semi-infinitos izquierdo (L) y derecho (R) (marcados en cian), donde l es el número de celdas unitarias (caja rectangular) de la parte central y W es su ancho, dado por el número de líneas en zigzag (N).

de transición, respectivamente. Además, debido a la asimetría de los bordes en las nanocintas zigzag de MoS_2 , compuestas de diferentes especies atómicas, la simetría de reflexión transversal en estos sistemas se rompe, en contraste con el caso de las nanocintas de grafeno (44). En consecuencia, se espera que las polarizaciones de espín perpendicular (P_z) y paralelas (P_x) no sean cero, a diferencia de las nanocintas zigzag de grafeno. (44, 30, 45). Para los cálculos de transporte cuántico, consideramos la región central que tiene ancho N y largo l a lo largo de las direcciones transversal (y) y transporte (x), respectivamente, con $N=10$ y $l=30$ que denotan el número de celdas unitarias [Fig. 6.9(b)], correspondiente a 47,49 nm para MoS_2 .

En la Fig. 6.10, mostramos la conductancia cuántica resuelta por espín $G_{ss'}$ en unidades de G_0 (Fig. 6.10(a)), conductancia cuántica total (G) definida por la ec. 3.71 (Fig. 6.10(b)), y los tres componentes (P_x , P_y y P_z) de la polarización de espín Fig. 6.10(c)) para una nanocinta zigzag de MoS_2 considerando $\lambda_R = 0,05$ eV. A continuación describimos las propiedades del transporte cuántico al comparar las características de MoS_2 . En las Fig. 6.10(a), las componentes de conductancia no exhiben mesetas perfectas; se observan oscilaciones, como también ocurre en las nanocintas zigzag de grafeno (27, 46). Se sabe que la amplitud de estas oscilaciones depende de la longitud de la parte central l y disminuye a medida que aumenta l , de manera análoga al transistor de efecto de campo de espín (FET), en el que el espín gira a medida que se mueve a través de la conductor debido al campo Rashba (27, 47, 48). Además, Las conductancias de espín conservado y de espín distintos, son diferentes para todas las direcciones de proyección de espín, es decir, $G_{\uparrow\uparrow} \neq G_{\downarrow\downarrow}$ y $G_{\downarrow\uparrow} \neq G_{\uparrow\downarrow}$, debido a la asimetría longitudinal en estas estructuras. Esto contrasta con las nanocintas zigzag de grafeno, donde $G_{\uparrow\uparrow} = G_{\downarrow\downarrow}$ y $G_{\downarrow\uparrow} = G_{\uparrow\downarrow}$ si el ancho de las cintas es N es par y el SOC intrínseco es cero pero EOR está presente. Más específicamente, en las nanocintas de MoS_2 (Fig. 6.10(a)), la conductancia de la contribución del cambio de espín es comparable a la del espín conservado, estando en una fase casi opuesta. En otras palabras, cuando la contribución spin-flip se desvanece, la que conserva

el spin alcanza su máximo, y viceversa.

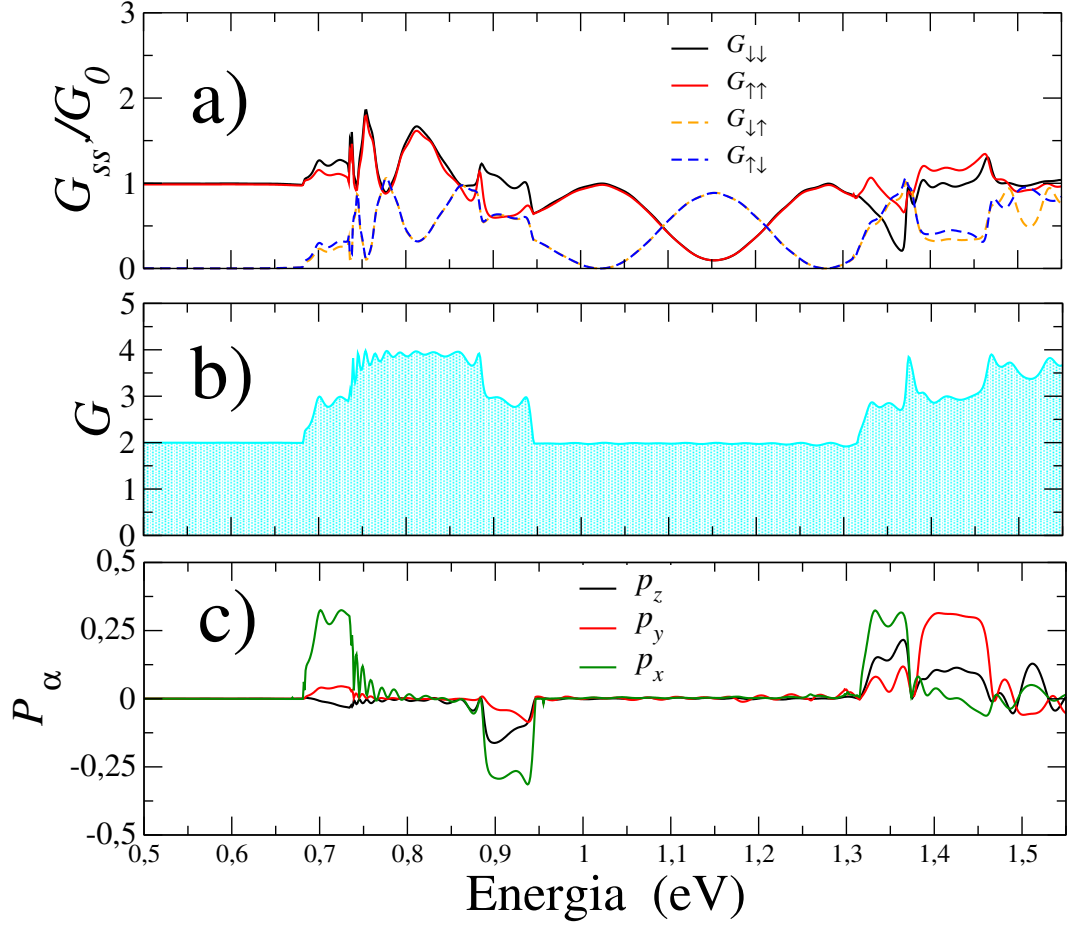


Figura 6.10: (a) Estructura de banda electrónica con $\lambda_R = 0$, (b) Estructura de banda electrónica considerando $\lambda_R = 0,05$ eV. $N = 10$.

La Fig. 6.10(b) muestran la conductancia cuántica total de la nanocinta de MoS_2 . De la figura, podemos ver que existen intervalos de energía que van de 0 a 0,7 eV y de 0,95 a 1,3 eV, en los que la conductancia total muestra mesetas casi perfectas. Además, el valor total mínimo es $2G_0$, consulte la Fig. 6.10(b). Con respecto a las polarizaciones de espín, que se muestran en la Fig. 6.10(c), encontramos que la mayor contribución a la polarización en MoS_2 proviene de los componentes P_x y P_y . Entre ellos, el componente P_x puede alcanzar más de 25 % en magnitud, tanto con signo positivo como negativo. A lo largo de la dirección transversal, la polarización de espín correspondiente (P_y) tiene valores similares a P_x mientras que solo se observan valores positivos en un intervalo de 1,39 – 1,46 eV para el Fermi energía. Además, esta característica es fuertemente dependiente del SOC intrínseco, y contrasta con las NZGR prístinas, donde solo el componente transversal no es despreciable (44). Estos notables resultados cuantitativos muestran que nuestro sistema puede comportarse como un filtro giratorio. Adicionalmente, observamos que la componente longitudinal puede alcanzar valores considerables cuando variamos la intensidad del acoplamiento espín-órbita Rashba.

Para obtener una visión más profunda de la polarización de espín, exploramos más a fondo la dependencia de la polarización de espín en el parámetro espín-órbita Rashba y la energía de Fermi. En las Figs. 6.11(a)–(d), mostramos el contorno de las tres componentes (P_x , P_y y P_z) de polarización de espín, y la

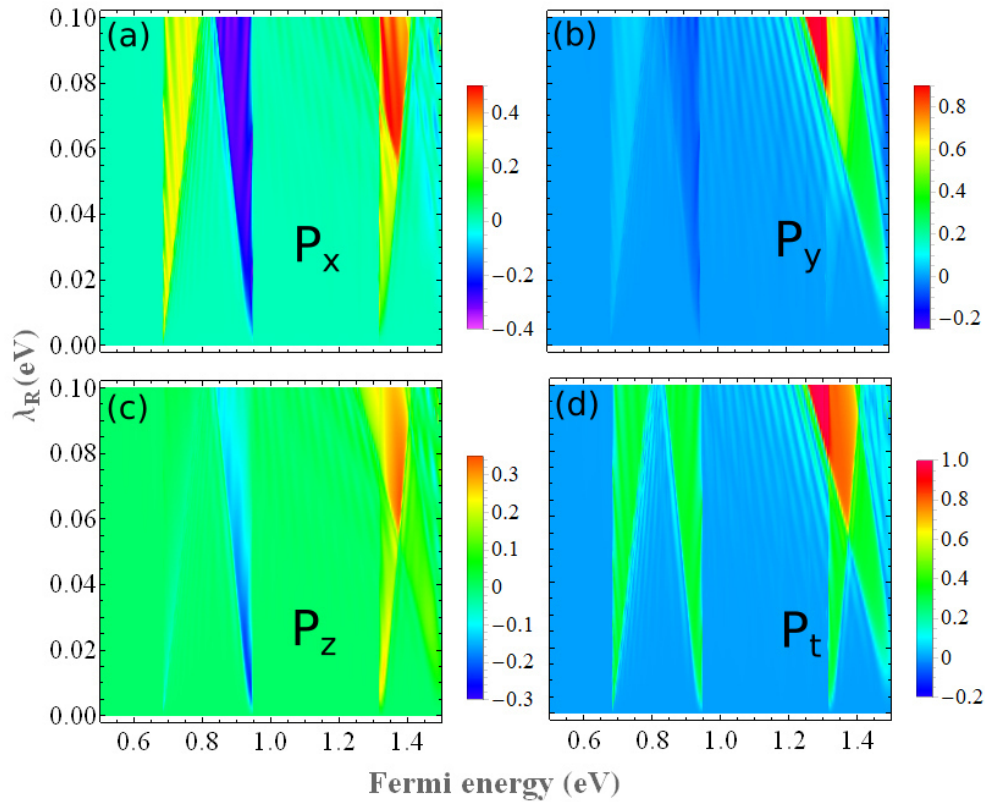


Figura 6.11: Contorno de las tres componentes, P_x (a), P_y (b), P_z (c) y total P_t (d) de la polarización de espín para una nanocinta zigzag de MoS_2 con $N = 10$ y $l = 30$ como función del parámetro de espín-órbita Rashba y energía de Fermi.

polarización total (P_t) como funciones de EOR y energía de Fermi para la nanocinta zigzag de MoS_2 . Comenzamos con la componente P_x (Fig. 6.11(a)). Observamos tres ramas de polarización de espín a diferentes energías de Fermi, que corresponden a los tres miniespacios en la estructura de bandas, ver Fig. 6.8(b). Curiosamente, P_x es positivo (color amarillo) en el rango de energía de $0,7 - 0,8$ eV, mientras que se vuelve negativo (color azul) cuando la energía de Fermi se encuentra en el rango de $0,85 - 1,0$ eV. Y vuelve a ser positivo (colores rojo y amarillo para parámetros EOR más altos y más bajos, respectivamente) a medida que aumenta aún más la energía de Fermi ($1,3 - 1,4$ eV). Por otro lado, para cada una de las tres ramas, el rango de energía se apaga considerablemente a medida que disminuye el parámetro EOR. Esto se debe a la disminución de minibrechas en la estructura de la banda con la disminución del parámetro EOR.

La dependencia de los componentes P_y y P_z sobre la fuerza EOR y la energía de Fermi se muestran en la Fig. 6.11(b) y Fig.6.11(c). También encontramos tres ramas en el mismo rango de energía que P_x . Sin embargo, la magnitud de P_y y P_z es menor que la de P_x . Curiosamente, a valores específicos de la energía de Fermi y alto parámetro de espín-órbita Rashba, P_t puede alcanzar su valor máximo 100% (color rojo), ver Fig. 6.11(d).

Demostramos que los dispositivos hechos de nanocintas zigzag de MoS_2 poseen polarización en diferentes direcciones incluso en ausencia de defectos y/o impurezas, que eran esenciales para las nanocintas zigzag de grafeno (31). Esto está en marcado contraste con el caso del grafeno, en el que solo la polarización de espín a lo largo de la dirección transversal (P_y) sobrevive bajo la condición de que la reflexión

transversal mantiene la simetría (44). Encontramos que el SOC intrínseco es un ingrediente clave para el surgimiento de polarización distinta de cero en todas las direcciones. Desde un punto de vista experimental, notamos que es factible medir los tres componentes de la polarización de espín, utilizando un filtro Wien y un detector Mott. (31, 13)

Tenga en cuenta que la corriente de borde polarizada de valle en las cintas *zigzag* de MoS_2 se puede inferir porque el espín y el valle están conjuntamente acoplados. Vale la pena comentar que la presencia de una alta concentración de trastornos o vacantes en los bordes podría afectar las propiedades de transporte de las nanocintas.(39)

7 DISCUSIÓN DE RESULTADOS

7.1. CONSTRATACIÓN DE HIPÓTESIS CON LOS RESULTADOS

En esta tesis investigamos las propiedades electrónicas como estructura de bandas y densidad de estados, así como las propiedades de transporte electrónico como conductancia y polarización en nanocintas *zigzag* de grafeno y Molibdenio de azufre (MoS_2). Las propiedades electrónicas, estructurales, mecánicas y de transporte en las nanocintas de grafeno vienen dadas básicamente por el orbital p_z , por tal motivo consideramos para este caso un orbital por sitio. Para el caso de las nanocintas de MoS_2 se tiene que tomar en cuenta tanto los orbitales del Mo como del S , por tanto se torna más complejo el cálculo numérico. En grafeno el parámetro de EOI es muy bajo, por eso se torna despreciable su uso, pero para fines prácticos ha sido considerado en esta tesis, pero en el caso de MoS_2 este parámetro es alto, por eso la diferencia clara entre las propiedades entre ambos materiales, por otro lado, cabe resaltar que en el caso de MoS_2 existen varios parámetros de *hopping*, estos parámetros disminuyen su valor con la distancia entre uno y otro átomo.

7.2. CONTRASTACIÓN DE RESULTADOS CON OTROS ESTUDIOS SIMILARES

En el presente trabajo se obtuvo las conductancias polarizaciones. Para el caso de las nanocintas de grafeno se hace uso de los terceros vecinos y para el caso de las nanocintas de MoS_2 se obtuvo la polarización de espín en las tres direcciones espaciales diferente del estudio mostrado por Salami (12), esto demuestra que con nuestro modelo que toma en cuenta los cuartos vecinos es posible tener mejores propiedades de transporte.

8 CONCLUSIONES

En esta tesis, abordamos el estudio de la estructura de bandas y de propiedades de transporte electrónicas tal como la conductancia y polarización en ausencia y presencia de las interacciones EOI y EOR. Para el caso de las NZGR adoptamos un orbital por sitio y para el caso de las NZ-DMT optamos por un enfoque multi-orbital por sitio, ambos casos fueron desarrollados dentro del enfoque *tight binding* o también llamado de enlace fuerte. Para hallar la conductancia de un dispositivo unido a dos contactos semi-infinitos adoptamos el método de las funciones de Green recursivas dentro del enfoque de Landauer-Büttiker donde se trabaja en el espacio real. En el caso de las NZGR vemos que la simetría partícula hueco es preservada, mientras que en el caso de las NZ- MoS_2 es quebrada. Por otro lado vemos que en estas nanocintas existe polarización en las tres direcciones espaciales. Esperamos que nuestros resultados estimulen investigaciones experimentales relevantes para estos novedosos sistemas unidimensionales

9 RECOMENDACIONES

En el presente trabajo de investigación se analizó las estructuras de banda de las nanocintas de grafeno y de MoS_2 para tal motivo se hizo uso del método *tight binding*, este método empírico es fácil de implementar y el costo computacional no es muy alto, salvo en el caso de los DMT donde si se requiere un cluster de computadoras para hacer el trabajo computacional menos costoso. El incremento de número de líneas *zigzag* se traduce en el aumento de la matriz hamiltoniana. En el presente trabajo hemos hecho uso de parámetros ya establecidos donde se ha hecho un *fitting* previamente sobre cálculos de primeros principios. El presente trabajo si bien es hecho en base al enfoque TB, podría también hacerse dentro del marco de primeros principios o aplicando la Teoría Funcional de la Densidad (TFD) además de que el lenguaje de programación puede ser escrito en Python o en R que son *open source* y de mayor influencia en el mundo científico actualmente.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1 DIAS, A.-C.; QU, F.; AZEVEDO, D.-L.; FU, J. Band structure of monolayer transition-metal dichalcogenides and topological properties of their nanoribbons: Next-nearest-neighbor hopping. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v.-98, p. 075202, Aug 2018. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.075202>>.
- 2 NOVOSELOV, K.-S.; GEIM, A.-K.; MOROZOV, S.-V.; JIANG, D.; ZHANG, Y.; DUBONOS, S.-V.; GRIGORIEVA, I.-V.; FIRSOV, A.-A. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, v.-306, n.-5696, p. 666–669, 2004. Disponível em: <<http://www.sciencemag.org/content/306/5696/666.abstract>>.
- 3 NETO, A.-H. C.; GUINEA, F.; PERES, N. M.-R.; NOVOSELOV, K.-S.; GEIM, A.-K. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v.-81, p. 109–162, Jan 2009. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.81.109>>.
- 4 GUNLYCKE, D.; ARESHKIN, D.-A.; LI, J.; MINTMIRE, J.-W.; WHITE, C.-T. Graphene nanostrip digital memory device. *Nano Letters*, American Chemical Society, v.-7, n.-12, p. 3608–3611, Dec 2007. ISSN 1530-6984. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/nl0717917>>.
- 5 ARESHKIN, D.-A.; GUNLYCKE, D.; WHITE, C.-T. Ballistic transport in graphene nanostrips in the presence of disorder: importance of edge effects. *Nano Letters*, American Chemical Society, v.-7, n.-1, p. 204–210, Jan 2007. ISSN 1530-6984. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/nl062132h>>.
- 6 CELIS, A.; NAIR, M.-N.; TALEB-IBRAHIMI, A.; CONRAD, E.-H.; BERGER, C.; HEER, W.-A. de; TEJEDA, A. Graphene nanoribbons: fabrication, properties and devices. *Journal of Physics D: Applied Physics*, v.-49, n.-14, p. 143001, 2016. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0022-3727/49/i=14/a=143001>>.
- 7 RUFFIEUX, P.; WANG, S.; YANG, B.; SÁNCHEZ-SÁNCHEZ, C.; LIU, J.; DIENEL, T.; TALIRZ, L.; SHINDE, P.; PIGNEDOLI, C.-A.; PASSERONE, D.; DUMSLAFF, T.; FENG, X.; MÜLLEN, K.; FASEL, R. On-surface synthesis of graphene nanoribbons with zigzag edge topology. *Nature*, v.-531, n.-7595, p. 489–492, Mar 2016. ISSN 1476-4687. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nature17151>>.
- 8 OSTAAY, J. A.-M. van; AKHMEROV, A.-R.; BEENAKKER, C. W.-J.; WIMMER, M. Dirac boundary condition at the reconstructed zigzag edge of graphene. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v.-84, p. 195434, Nov 2011. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.84.195434>>.
- 9 WHITE, C.-T.; LI, J.; GUNLYCKE, D.; MINTMIRE, J.-W. Hidden one-electron interactions in carbon nanotubes revealed in graphene nanostrips. *Nano Letters*, v.-7, n.-3, p. 825–830, 2007. PMID: 17295547. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/nl0627745>>.
- 10 XIAO, D.; LIU, G.-B.; FENG, W.; XU, X.; YAO, W. Coupled spin and valley physics in monolayers of mos_2 and other group-vi dichalcogenides. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v.-108, p. 196802, May 2012. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.108.196802>>.
- 11 WALLACE, P.-R. The band theory of graphite. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v.-71, p. 622–634, May 1947. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.71.622>>.
- 12 SALAMI, N.; SHOKRI, A. Tunable spin polarization of mos_2 nanoribbons without time-reversal breaking. *Superlattices and Microstructures*, v.-109, p. 605–618, 2017. ISSN 0749-6036. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0749603617309643>>.

- 13 KISKER, E. Measurement of the three components of the electron-spin polarization vector. *Review of Scientific Instruments*, v.~53, n.~4, p. 507–508, 1982. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.1136999>>.
- 14 ASHCROFT, N.~W.; MERMIN, N.~D. *Solid State Physics*. 1. ed. New York: Brooks Cole, 1976.
- 15 SAITO, G.~D. R.; DRESSELHAUS, M.~S. *Physical Properties of Carbon Nanotubes*. 1. ed. London: Imperial College Press, 1998.
- 16 M.R.GUASSI. *Transições de fase topológica e transporte eletrônico em grafeno e nanofitas zigzag de grafeno tensionadas*. Phd. Brasília-Brasil: Universidade de Brasília, Abril 2015.
- 17 YAZYEV, O.~V. Emergence of magnetism in graphene materials and nanostructures. *Reports on Progress in Physics*, v.~73, n.~5, p. 056501, 2010. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0034-4885/73/i=5/a=056501>>.
- 18 WAKABAYASHI, K.; SIGRIST, M.; FUJITA, M. Spin wave mode of edge-localized magnetic states in nanographite zigzag ribbons. *Journal of the Physical Society of Japan*, v.~67, n.~6, p. 2089–2093, 1998. Disponível em: <<https://doi.org/10.1143/JPSJ.67.2089>>.
- 19 EZAWA, M. Peculiar width dependence of the electronic properties of carbon nanoribbons. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v.~73, p. 045432, Jan 2006. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.045432>>.
- 20 CORREA, J.~H.; PEZO, A.; FIGUEIRA, M.~S. Braiding of edge states in narrow zigzag graphene nanoribbons: Effects of third-neighbor hopping on transport and magnetic properties. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v.~98, p. 045419, Jul 2018. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.045419>>.
- 21 RIDOLFI, E.; LE, D.; RAHMAN, T.~S.; MUCCIOLO, E.~R.; LEWENKOPF, C.~H. A tight-binding model for MoS₂ monolayers. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v.~27, n.~36, p. 365501, aug 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0953-8984/27/36/365501>>.
- 22 CORREA, J.~H.; DIAS, A.~C.; VILLEGAS-LELOVSKY, L.; FU, J.; CHICO, L.; QU, F. Anisotropy of the spin-polarized edge current in monolayer transition metal dichalcogenide zigzag nanoribbons. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v.~101, p. 195422, May 2020. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.101.195422>>.
- 23 ECONOMOU, E.~N. *Greens Functions in Quantum Physics*. 3. ed. Berlin: Springer-Verlag, 2006.
- 24 S.DATTA. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. 1. ed. Cambridge: Imperial College Press, 1995.
- 25 NARDELLI, M.~B. Electronic transport in extended systems: Application to carbon nanotubes. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v.~60, p. 7828–7833, Sep 1999. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.60.7828>>.
- 26 LEWENKOPF, C.; MUCCIOLO, E. The recursive green's function method for graphene. *Journal of Computational Electronics*, Springer US, v.~12, n.~2, p. 203–231, 2013. ISSN 1569-8025. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s10825-013-0458-7>>.
- 27 DINIZ, G.~S.; GUASSI, M.~R.; QU, F. Controllable spin-charge transport in strained graphene nanoribbon devices. *Journal of Applied Physics*, v.~116, n.~11, p. 113705, 2014. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.4896251>>.

- 28 SANCHO, M. P.-L.; SANCHO, J. M.-L.; RUBIO, J. Quick iterative scheme for the calculation of transfer matrices: application to mo (100). *Journal of Physics F: Metal Physics*, IOP Publishing, v.-14, n.-5, p. 1205–1215, may 1984. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0305-4608/14/5/016>>.
- 29 CHANG, P.-H.; MAHFOUZI, F.; NAGAOSA, N.; Ć, B.-K. Nikoli. Spin-seebeck effect on the surface of a topological insulator due to nonequilibrium spin-polarization parallel to the direction of thermally driven electronic transport. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v.-89, p. 195418, May 2014. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.195418>>.
- 30 ZHANG, Q.; JIANG, J.; CHAN, K. Electrically controllable spin transport in bilayer graphene with rashba spin-orbit interaction. *Physics Letters A*, v.-383, n.-24, p. 2957–2962, 2019. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037596011930550X>>.
- 31 GANGULY, S.; BASU, S.; MAITI, S.-K. Unconventional charge and spin-dependent transport properties of a graphene nanoribbon with line-disorder. *EPL (Europhysics Letters)*, IOP Publishing, v.-124, n.-5, p. 57003, dec 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1209/0295-5075/124/57003>>.
- 32 ZHANG, Q.; JIANG, J.; CHAN, K. Electrically controllable spin transport in bilayer graphene with rashba spin-orbit interaction. *Physics Letters A*, 2019. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037596011930550X>>.
- 33 STRANGE, P. *Relativistic Quantum Mechanics*. 1. ed. USA: Cambridge University Press, 1998.
- 34 MARTINO, A.-D.; EGGER, R. Rashba spin-orbit coupling and spin precession in carbon nanotubes. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v.-17, n.-36, p.-5523, 2005. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0953-8984/17/i=36/a=008>>.
- 35 HALDANE, F. D.-M. Model for a quantum hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly". *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v.-61, p. 2015–2018, Oct 1988. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.61.2015>>.
- 36 KANE, C.-L.; MELE, E.-J. Quantum spin hall effect in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v.-95, p. 226801, Nov 2005. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.226801>>.
- 37 KANE, C.-L.; MELE, E.-J. z_2 topological order and the quantum spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v.-95, p. 146802, Sep 2005. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.146802>>.
- 38 SLATER, J.-C.; KOSTER, G.-F. Simplified lcao method for the periodic potential problem. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v.-94, p. 1498–1524, Jun 1954. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.94.1498>>.
- 39 RIDOLFI, E.; LIMA, L. R.-F.; MUCCILOLO, E.-R.; LEWENKOPF, C.-H. Electronic transport in disordered mos_2 nanoribbons. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v.-95, p. 035430, Jan 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.035430>>.
- 40 PERES, N. M.-R.; NETO, A.-H. C.; GUINEA, F. Conductance quantization in mesoscopic graphene. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v.-73, p. 195411, May 2006. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.195411>>.
- 41 CHU, R.-L.; LIU, G.-B.; YAO, W.; XU, X.; XIAO, D.; ZHANG, C. Spin-orbit-coupled quantum wires and majorana fermions on zigzag edges of monolayer transition-metal dichalcogenides. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v.-89, p. 155317, Apr 2014. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.155317>>.

- 42 ZHOU, B.-T.; TAGUCHI, K.; KAWAGUCHI, Y.; TANAKA, Y.; LAW, K.-T. Spin-orbit coupling induced valley hall effects in transition-metal dichalcogenides. *Communications Physics*, v.~2, n.~1, p.~26, Mar 2019. ISSN 2399-3650. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s42005-019-0127-7>>.
- 43 XU, G.; WANG, J.; YAN, B.; QI, X.-L. Topological superconductivity at the edge of transition-metal dichalcogenides. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v.~90, p. 100505, Sep 2014. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.100505>>.
- 44 LIU, J.-F.; CHAN, K.-S.; WANG, J. A bipolar spin-filtering effect in graphene zigzag nanoribbons with spin-orbit coupling. *Nanotechnology*, England, v.~23, n.~9, p. 095201, fev. 2012.
- 45 CHICO, L.; LATGÉ, A.; BREY, L. Symmetries of quantum transport with rashba spin-orbit: graphene spintronics. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, The Royal Society of Chemistry, v.~17, p. 16469–16475, 2015. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/C5CP01637A>>.
- 46 KARIMINEZHAD, M.; NAMIRANIAN, A. Spin-polarized transport in zigzag graphene nanoribbons with rashba spin-orbit interaction. *Journal of Applied Physics*, v.~110, n.~10, p. 103702, 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.3660704>>.
- 47 DATTA, S.; DAS, B. Electronic analog of the electro-optic modulator. *Applied Physics Letters*, v.~56, n.~7, p. 665–667, 1990. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.102730>>.
- 48 RADISAVLJEVIC, B.; RADENOVIC, A.; BRIVIO, J.; GIACOMETTI, V.; KIS, A. Single-layer mos2 transistors. *Nature Nanotechnology*, v.~6, n.~3, p. 147–150, Mar 2011. ISSN 1748-3395. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nnano.2010.279>>.
- 49 THOULESS, D.-J.; KIRKPATRICK, S. Conductivity of the disordered linear chain. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v.~14, n.~3, p.~235, 1981. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0022-3719/14/i=3/a=007>>.
- 50 G.METALIDIS. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Phd. Germany: Max-Planck-Institute of Microstructure Physics, Jan 2007.
- 51 P.DIETL. *Numerical Studies of Electronic Transport through Graphene Nanoribbons with Disorder*. Phd. Germany: University at Karlsruhe, Jan 2009.
- 52 D.A.BAHAMON. *Acomplamento entre estados de borda e suas assinaturas em anéis quânticos e nanofitas de grafeno*. Phd. Campinas-Brasil: Universidade Estadual de Campinas, Julio 2011.
- 53 J.J.SAKURAI, J.-N. *Modern Quantum Mechanics*. 2. ed. Boston: Addison-Wesley, 2011.

APÉNDICES

I.1. MATRIZ DE CONSISTENCIA

Título de Tesis: Propiedades electrónicas y de transporte de nanocintas de grafeno y dicalcogenuros de metales de transición mediante la interacción espín-órbita usando el método *Tight Binding*.

Problema	Objetivos	Hipótesis	Metodología	Población y muestra
<p>Problema general: ¿Se puede determinar la conductancia y polarización en las nanocintas de grafeno y dicalcogenuros de metales de transición considerando un modelo <i>tight binding</i>?</p> <p>Problemas específicos : • ¿Cómo la interacción espín-órbita afecta la polarización en las nanocintas de grafeno y dicalcogenuros de metales de transición?</p> <ul style="list-style-type: none"> • ¿Las nanocintas en ausencia de espín-órbita son metálicas? • ¿Cuál es la influencia de la energía en la formación de grupos de mayor tamaño? • ¿Cual es la diferencia básica entre la aproximación <i>tight binding</i> y métodos de primeros principios en el cálculo de las propiedades electrónicas y de transporte? 	<p>Objetivo general: Determinar la estructura de banda, densidad de estados, conductancia y polarización en nanocintas con bordes <i>zigzag</i> de grafeno y dicalcogenuros de metales de transición.</p> <p>Objetivos específicos :</p> <ul style="list-style-type: none"> • Hacer un comparativo entre las estructuras de banda de grafeno y dicalcogenuros de metales de transición. • Introducir los parámetros de espín-órbita y ver como es afectada la conductancia. • Determinar si es posible encontrar polarización en las direcciones, x, y, z, en ambos materiales. 	<p>Hipótesis general: Si Las propiedades electrónicas y de transporte en nanocintas de grafeno y dicalcogenuros de metales de transición son metálicas entonces la polarización en ambos materiales presenta diferente comportamiento.</p> <p>Hipótesis específicas: El parámetro de <i>hopping</i> en las NZGR, tomaría un orbital por sitio debido a su naturaleza planar, las NZ-DMT, utilizaría terminos de <i>hopping</i> debido a su carácter no-planar. Las propiedades de transporte G y P en ambos materiales depende del valor del espín-órbita .</p>	<p>Tipo de investigación: El presente trabajo es un estudio del tipo básico desarrollado dentro del área de la física teórica y computacional. Específicamente, en torno al estudio de sistemas bidimensionales. Los procedimientos a ser usados son los analíticos combinados con técnicas numérico-computacionales.</p> <p>Diseño de la investigación: Emplear el método <i>tight binding</i>, el cual es un enfoque para el cálculo de propiedades electrónicas y de transporte usando herramientas teóricas.</p>	<p>Población: Para esta investigación la población estará compuesta por los diversos modelos teóricos considerando un orbital por sitio en el caso de nanocintas de grafeno y un caso multiorbital en el caso de nanocintas de dicalcogenuros de metales de transición.</p> <p>Muestra: Para esta investigación la población estará compuesta por los diversos modelos teóricos considerando un orbital por sitio en el caso de nanocintas de grafeno y un caso multiorbital en el caso de nanocintas de dicalcogenuros.</p>

I.2. MÉTODO RECURSIVO DE LAS FUNCIONES DE GREEN

El método recursivo de las funciones de Green se ha convertido en un marco adecuado para calcular la función de Green de grandes sistemas. Este método fue inicialmente desarrollado para calcular la conductancia electrónica en cadenas atómicas lineales (49), y posteriormente implementada a un sistema bidimensional en la formulación de capas, en la que es la forma más utilizada en la actualidad (50, 51, 52). La idea básica en este método es descomponer el sistema en partes independientes (contactos y capas), donde asumimos que se conoce la función g de la camada desconectada, de esta forma se puede obtener recursivamente la función de Green total a través de la ecuación de Dyson (53)

$$G = g + gVG \quad (1)$$

donde G representa la función de Green exacta, g es la función de green sin perturbación que corresponde a una sola capa, y V es la matrix de acoplamiento entre capas vecinas. De acuerdo con la Fig. 1, el sistema es quebrado en N capas, de esta forma las capas con números menores a 1 representan el contacto de la izquierda y las capas con números mayores a N representan el contacto de la derecha. Para nuestros cálculos usaremos las funciones de Green retardadas, así podemos definir

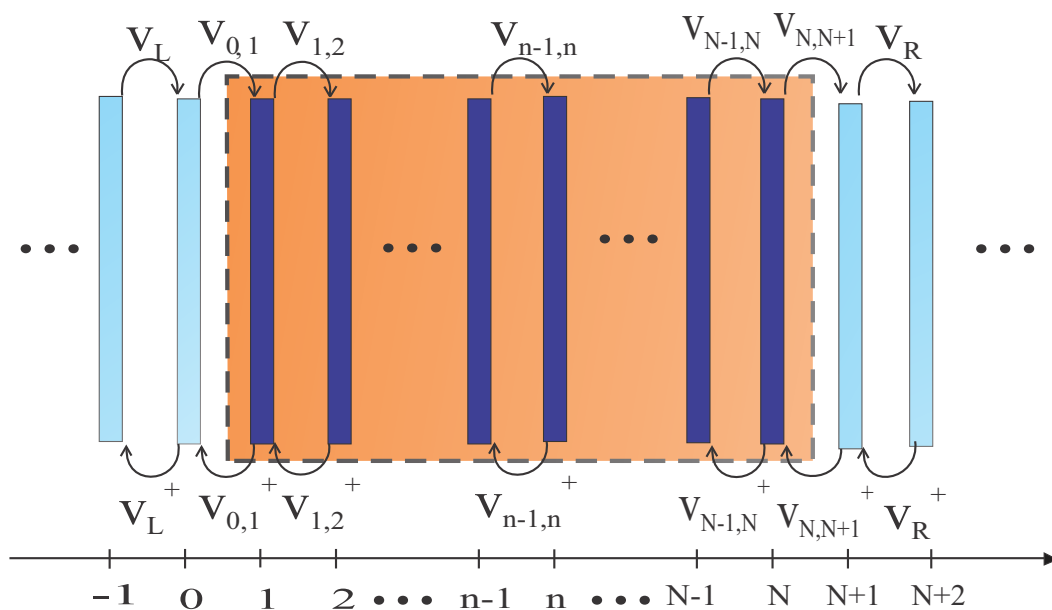


Figura 1: Esquema de capas, donde el rectángulo central (naranja) contiene las capas que representan al conductor. Las capas con números menores a 1 representan el contacto de la izquierda y las capas con números mayores a N representan el contacto de la derecha

$$g_n(E) = (E + i\eta - h_n)^{-1} \quad (2)$$

como la función de Green de la n -ésima capa del sistema, donde h_n denota el Hamiltoniano de la n -ésima capa aislada. Con esto en mente, vamos a aplicar la ecuación de Dyson para construir una familia de funciones de Green que acopa la parte central (conductor) al contacto izquierdo L y de la misma forma construir una familia de funciones de Green que acopa el conductor al contacto de la derecha R , finalizamos nuestro cálculo juntando esas dos familias para obtener la función de Green total $G_{0,N+1}^r$ que es nuestro objetivo.

I.2.1. Funciones de Green de la izquierda

Para recorrer el conductor por la izquierda, necesitamos encontrar la función de Green G^L , para esto, el primer paso es incorporar la capa $n = 1$ a la función de Green del contacto izquierdo g_L . Este tipo de operación es repetida durante todo el método y por tanto presentamos esto en detalle (26). Para nuestro objetivo, introducimos los *kets* $|0\rangle$ y $|1\rangle$ el cual representan los estados donde los electrones son encontrados en capas $n = 0$ y $n = 1$, respectivamente. De esta forma

$$G_{1,1}^L = \langle 1|G^L|1\rangle \quad (3)$$

$$= \langle 1|g|1\rangle + \sum_{m,m'} \langle 1|g|m\rangle \langle m|V|m'\rangle \langle m'|G^L|1\rangle \quad (4)$$

$$= \langle 1|g|1\rangle + \langle 1|g|1\rangle \langle 1|V|0\rangle \langle 0|G^L|1\rangle \quad (5)$$

$$G_{1,1}^L = g_1 + g_1 V_{1,0} G_{0,1}^L \quad (6)$$

En la ec. 6, fue usada la relación de completitud. Para encontrar la función de Green $G_{1,1}^L$, necesitamos de la función $G_{0,1}^L$, la cual puede ser encontrada aplicando el procedimiento anterior, así, tenemos

$$G_{0,1}^L = \langle 0|G^L|1\rangle \quad (7)$$

$$= \langle 0|g|1\rangle + \sum_{m,m'} \langle 0|g|m\rangle \langle m|V|m'\rangle \langle m'|G^L|1\rangle \quad (8)$$

$$= \langle 0|g|0\rangle \langle 0|V|1\rangle \langle 1|G^L|1\rangle \quad (9)$$

$$G_{0,1}^L = g_L V_{0,1} G_{1,1}^L \quad (10)$$

donde es claro que $\langle 0|g|1\rangle = 0$, ya que las funciones g son definidas para capas aisladas, además hemos definido $g_L = \langle 0|g|0\rangle$. Colocando 10 en 6, tenemos

$$G_{1,1}^L = (E + i\eta - h_1 - V_{1,0} g_L V_{0,1})^{-1} \quad (11)$$

Así la función $G_{1,1}^L$ es la función de Green que toma en cuenta el acoplamiento de la primera capa con el contacto de la izquierda. Con $G_{1,1}^L$ dado por 11 podemos evaluar la siguiente función de Green sucesiva, así para la capa $n = 2$, la función $G_{2,2}^L$ es dada por

$$G_{2,2}^L = \langle 2|G^L|2 \rangle \quad (12)$$

$$= \langle 2|g|2 \rangle + \sum_{m,m'} \langle 1|g|m \rangle \langle m|V|m' \rangle \langle m'|G^L|2 \rangle \quad (13)$$

$$= \langle 2|g|2 \rangle + \langle 2|g|2 \rangle \langle 2|V|1 \rangle \langle 1|G^L|2 \rangle \quad (14)$$

$$G_{2,2}^L = g_2 + g_2 V_{2,1} G_{1,2}^L \quad (15)$$

la función de Green $G_{1,2}^L$, puede ser fácilmente encontrada mediante la ecuación de Dyson, la cual resulta

$$G_{1,2}^L = G_{1,1}^L V_{1,2} G_{2,2}^L \quad (16)$$

Sustituyendo Substituyendo 16 em 15, tenemos

$$G_{2,2}^L = (E + i\eta - h_2 - V_{2,1} G_{1,1}^L V_{1,2})^{-1} \quad (17)$$

de forma que generalizando, podemos obtener la siguiente relación de recurrencia

$$G_{n,n}^L = (E + i\eta - h_n - V_{n,n-1} G_{n-1,n-1}^L V_{n-1,n})^{-1} \quad (18)$$

con $n = 2, \dots, N$. Para capas dentro del conductor podemos escoger la función no perturbada $g = G_{n-1,n-1}^L$, de forma que la relación de recurrencia general de 10 es dada por

$$G_{0,n}^L = G_{0,n-1}^L V_{n-1,n} G_{n,n}^L \quad (19)$$

1.2.2. Funciones de Green de la derecha

Para encontrar la familia de funciones de Green de la derecha, el conductor es recorrido de la derecha para la izquierda. Haciendo un cálculo semejante de la sección anterior para la última capa conectada al contacto de la derecha, tenemos

$$G_{N,N}^R = g_N + g_N V_{N,N+1} G_{N+1,N}^R \quad (20)$$

de la misma forma como fue hecho en 10 la función de Green $G_{N+1,N}^R$ es dada por

$$G_{N+1,N}^R = g_R V_{N+1,N} G_{N,N}^R \quad (21)$$

colocando la última ecuación en 20, obtenemos la función de Green de la última capa conectado al contacto de la izquierda, expresado como

$$G_{N,N}^R = (E + i\eta - h_N - V_{N,N+1}g_R V_{N+1,N})^{-1} \quad (22)$$

de forma semejante como fue mostrado en la ec. 18, podemos encontrar una relación de recurrencia para las funciones de Green de la derecha, la cual puede ser expresada como

$$G_{n,n}^R = (I - g_n V_{n,n+1} G_{n+1,n+1}^R V_{n+1,n})^{-1} g_n, \quad (23)$$

con $n = N - 1, \dots, 1$. Sustituyendo la función $g_n = (E + i\eta - h_n)^{-1}$ en la ecuación anterior, tenemos

$$G_{n,n}^R = (E + i\eta - h_n - V_{n,n+1} G_{n+1,n+1}^R V_{n+1,n})^{-1} \quad (24)$$

además, siguiendo el método de la ec. 19, tenemos

$$G_{N+1,n}^R = G_{N+1,n+1}^R V_{n+1,n} G_{n,n}^R \quad (25)$$

I.2.3. Funciones de Green Total

Ya sea que en el conductor se recorra por la izquierda o derecha, vamos a obtener la función de Green $G_{0,N+1}^r$. La función de Green total del sistema es calculada usando nuevamente la ec. de Dyson 1 y la Fig. 1

$$G_{n,n} = g_n + g_n (V_{n,n+1} G_{n-1,n} + V_{n,n+1} G_{n+1,n}) \quad (26)$$

$$G_{n-1,n} = G_{n-1,n-1}^L V_{n-1,n} G_{n,n} \quad (27)$$

$$G_{n+1,n} = G_{n+1,n+1}^R V_{n+1,n} G_{n,n} \quad (28)$$

de modo que después de un álgebra elemental, podemos obtener $G_{n,n}$ como

$$G_{n,n} = (E + i\eta - h_n - V_{n,n-1} G_{n-1,n-1}^L V_{n-1,n} - V_{n,n+1} G_{n+1,n+1}^R V_{n+1,n})^{-1} \quad (29)$$

de la misma forma como fue hecho en 19 y 25, podemos tener dos relaciones de recurrencia importantes, dadas por

$$G_{0,n} = G_{0,n-1}^L V_{n-1,n} G_{n,n} \quad (30)$$

$$G_{N+1,n} = G_{N+1,n+1}^R V_{n+1,n} G_{n,n} \quad (31)$$

Una vez que estas relaciones son encontradas, ya podemos encontrar la función de Green de nuestro con-

ductor $G_{0,N+1}$, de forma que si recorremos el conductor desde la izquierda y usando la ec. 30, se obtiene

$$G_{0,N+1} = G_{0,N}^L V_{N,N+1} G_{N+1,N+1} \quad (32)$$

donde $G_{N+1,N+1}$ es encontrada usando la ec. 29 y dada por

$$G_{N+1,N+1} = (E + i\eta - h_R - V_{N+1,N} G_{N,N}^L V_{N+1,N+1})^{-1} \quad (33)$$

De esa manera podemos encontrar la conductancia.