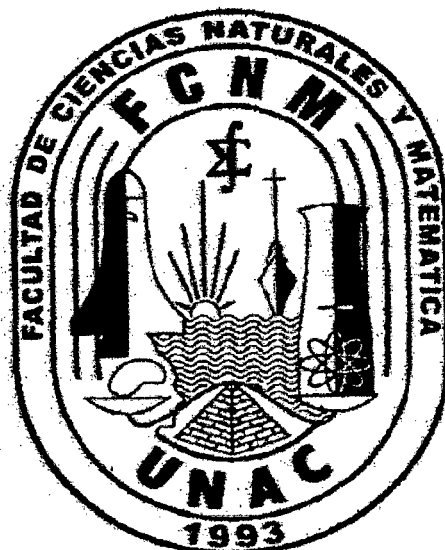


# UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO

FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA

ESCUELA PROFESIONAL DE FÍSICA



“ESPECTRO DE PARTICULA INDEPENDIENTE EN POZOS CUÁNTICOS  
DE GRAFENO”

TESIS PARA OPTAR EL TÍTULO  
DE LICENCIADO EN FÍSICA

Bach. CESAR ENRIQUE PEREZ VILLEGAS

ENERO 2011

CALLAO-PERÚ

**HOJA DE PRESENTACIÓN**

**"ESPECTRO DE PARTÍCULA INDEPENDIENTE EN POZOS CUÁNTICOS  
DE GRAFFING"**

**Bach. CESAR ENRIQUE PEREZ VILLEGAS**

Tesis presentada a consideración del Consejo de Docentes de la Facultad de Ciencias Naturales y Matemática de la Universidad Nacional del Callao, como parte de los requisitos para obtener el Título de Licenciado en Física. Aprobado por:

---

**Dr. Walter Flores Vega**

Presidente

---

**Lic. Rolando Vega de la Peña**

Vocal

---

**Dr. Jesús Sánchez Ortiz**

Secretario

---

**Dr. Pablo Gonzales Ormefeo**

Suplente

**CALLAO-PERÚ**

**ENERO 2011**

## FICHA CATALOGRÁFICA

**CESAR ENRIQUE PEREZ VILLEGAS**

Espectro de partícula independiente en pozos cuánticos de Grafeno, CALLAO (2011).

xii, 75p., 29,7 cm (UNAC, Licenciado en Física, 2011).

Tesis, Universidad Nacional del Callao, Facultad de Ciencias Naturales y Matemática 1.  
Física.

I. UNAC/FCNM II. Título (Serie).

# Agradecimientos

Quiero agradecer primero a Dios. A mis Padres y hermanas por estar siempre conmigo, en los buenos y malos momentos, con sus palabras de aliento. En particular quiero agradecer al Profesor Jorge Abel Espichán Carrillo y al profesor Marcos Tavares por la paciencia y sinceridad que tuvieron durante el tiempo que demoré en realizar esta tesis. Mucha gratitud también a mis compañeros José, Daniel, Fabián y al Gigante por hacer de la investigación algo divertida. Finalmente quiero agradecer a la Universidad Nacional del Callao por haberme formado como Bachiller en Física y a todos aquellos que contribuyeron de alguna forma para la realización de esta tesis.

# Resumen

## “ESPECTRO DE PARTÍCULA INDEPENDIENTE EN POZOS CUÁNTICOS DE GRAFENO”

AUTOR: CESAR ENRIQUE PEREZ VILLEGAS

ENERO - 2011

Asesor: Dr. Jorge Abel Espichán Carrillo

Título obtenido: Licenciado en Física

En el presente trabajo estudiamos teóricamente el espectro de partícula independiente de los fermiones de Dirac en el Grafeno cuando este material es sometido a potenciales electrostáticos orientados en una dirección del espacio. Dentro de este contexto, son discutidas las condiciones sobre las cuales los estados confinados aparecen en la estructura. Calculamos analíticamente la expresión que gobierna la energía de los fermiones, estudiando su dependencia con el vector de onda, con los anchos de los pozos y barreras que forman los hilos de grafeno, así como también con los parámetros fenomenológicos (de masa) originados debido a la interacción de los átomos del grafeno con el sustrato donde es crecido. Encontramos una fuerte dependencia entre estos parámetros y la concentración de los portadores de carga en un determinado pozo. También, estudiamos las circunstancias sobre las cuales los estados extendidos están presentes en la estructura. Este análisis es hecho a través de la densidad de probabilidad de los electrones para una dada subbanda. Finalmente estudiamos los efectos que la variación en los parámetros de la estructura, así como el parámetro fenomenológico  $\beta$ , inducen sobre la conductancia a lo largo de la dirección de los hilos. Discutimos y analizamos de manera sistemática los efectos de la anisotropía espacial en los resultados de la conductancia.

**Palabras claves:**

Grafeno

Pozos cuánticos

Estados confinados.

# Abstract

**"SINGLE PARTICLE SPECTRA IN GRAPHENE QUANTUM WELLS"**

**AUTHOR: CESAR ENRIQUE PEREZ VILLEGAS**

**JANUARY 2011**

**Advisor: Dr. Jorge Abel Espichán Casallo**

In this work we theoretically study the single particle spectra of Dirac fermions in Graphene, when the material is submitted into the presence of an electrostatic potential in a given direction. In this way, we discuss the necessary conditions to confined states exists in the structure. We analytically calculate the expressions for the energy of Dirac fermions, and study its dependence with the wave-vector, width of the wells and barriers, and the mass term which arise as a consequence of the Graphene's atoms and the substrate, which arise as a consequence of the interaction between the substrate and Graphene. We find a strong dependence between those parameters and the charge carriers concentration in a given well. We also study the circumstances for which extended states are present in the structure. This study is done through the density of probability function of electrons in a given subband. At last, we study the effects that the variation of the parameters of the structure as well as the mass term, induced over the conductance along of wire's direction. We discuss and analyse systematically the signatures of the spatial anisotropy in the results of the conductance.

## **KEYWORDS:**

Graphene

Quantum wells

Confined states.

# Índice general

Índice de figuras	IX
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Fundamentos teóricos</b>	<b>7</b>
2.1. El carbono y sus hibridaciones	7
2.1.1. Hibridación $sp$	8
2.1.2. Hibridación $sp^2$	9
2.1.3. Hibridación $sp^3$	11
2.2. Estructura electrónica del grafeno	11
2.2.1. Modelo <i>Tight Binding</i> (TB) para 2 átomos por celda unitaria: Aplicación en el grafeno	13
2.2.2. Hamiltoniano efectivo para energías bajas: Ecuación de Dirac	19
2.2.3. Caracterización experimental de la estructura de banda	21
2.3. Pozos cuánticos basados en grafeno	23
2.3.1. Descripción del modelo teórico	23
2.3.2. Funciones de onda para los estados confinados	26
2.3.3. Condiciones de contorno	27
2.3.4. Espectro de energía	29
<b>3. Materiales y métodos</b>	<b>33</b>
3.1. Materiales	33
3.2. Métodos	33
<b>4. Análisis de los resultados y discusión</b>	<b>35</b>
4.1. Modos de energía	35
4.2. Parámetro de masa $\beta = 0$	37

4.2.1. Hilos cuánticos simétricos .....	37
4.2.2. Hilos cuánticos asimétricos .....	40
4.3. Parámetro de masa $\beta \neq 0$ .....	43
4.3.1. Efectos en la conductancia relacionados a $\Delta$ .....	44
4.3.2. Control de la densidad de portadores de carga .....	46
<b>5. Conclusiones y perspectivas</b> .....	<b>49</b>
<b>A. Puntos no equivalentes</b> .....	<b>50</b>
A.1. Puntos K y K' .....	50
<b>B. Ecuación de Dirac 2D</b> .....	<b>52</b>
B.1. Aproximación para bajas energías .....	52
<b>C. Funciones de onda</b> .....	<b>54</b>
C.1. Componente del pseudo-espinor .....	54
<b>D. Matriz M</b> .....	<b>55</b>
D.1. Elementos de Matriz .....	55
<b>E. Programa numérico</b> .....	<b>57</b>
<b>Bibliografía</b> .....	<b>69</b>



# Índice de figuras

2.1. Esquema de la configuración electrónica para el átomo de carbono. Estado fundamental (derecha) y estado excitado (izquierda) . . . . .	8
2.2. (a) Formación de los orbitales hibridizados $sp$ . (b) Molécula del acetileno, mostrando la formación de una ligación $\sigma$ debido a los orbitales hibridizados $sp$ , y la formación de dos enlaces $\pi$ debido a los orbitales $2p_y$ e $2p_z$ . Imágenes adaptadas de las referencias [30, 31] respectivamente. . . . .	9
2.3. (a) Formación de los orbitales hibridizados $sp^2$ . Notese que estos orbitales cuando están juntos forman un ángulo de $120^\circ$ . (b) Molécula de etano mostrando la formación de un enlace $\sigma$ debido a los orbitales hibridizados $sp^2$ , y un enlace $\sigma$ debido al orbital no hibridizado $2p_z$ . Imágenes adaptadas de la referencia [30, 32]. . . . .	10
2.4. Representación esquemática de la red cristalina hexagonal de grafeno. La red es constituida por 2 átomos denominados como, $A$ y $B$ . Un átomo de la subred triangular de tipo $A$ está ligado a 3 átomos de subred triangular de tipo $B$ , y viceversa. . . . .	12
2.5. (a) Estructura cristalina del grafeno indicando los vectores base $a_1$ y $a_2$ que forman una red de Bravais, así como también las posiciones de los primeros vecinos del átomo de tipo $B$ . (b) Red recíproca del cristal grafeno. La región oscura indica la primera Zona de Brillouin. Los puntos de alta simetría $\Gamma$ , $K$ y $M$ son indicados. . . . .	13
2.6. Red hexagonal de grafeno indicando las posiciones atómicas de los átomos vecinos. Los círculos indican los primeros y segundos vecinos del átomo de tipo $B$ . . . . .	15

2.7. (a) Estructura de banda del grafeno obtenida de la aproximación <i>Tight Binding</i> , considerando los orbitales atómicos $\pi$ y $\pi^*$ . Note que las bandas $\pi$ y $\pi^*$ se interceptan en las 6 esquinas de la primera Zona de Brillouin. (b) Estructura de banda a lo largo de los puntos de alta simetría de la primera Zona de Brillouin. Note que en los alrededores de los puntos $K$ la relación entre la energía y el vector de onda es lineal. . . . .	18
2.8. Representación esquemática de un experimento de ARPES. El analizador detecta los electrones fotoemitidos. Estos electrones poseen una cantidad de movimiento que es función de los ángulos polares e azimutales. Adaptada de la Ref. [46] . . . . .	22
2.9. Resultados experimentales, de medidas de relación de dispersión usando <i>ARPES</i> sobre una muestra de grafeno epitaxial. (a) Estructura de banda a lo largo de los puntos de alta simetría. (b) Primera Zona de Brillouin (PZB). (c) PZB para los puntos de Dirac. (d) PZB para un grafeno dopado. Adaptada de la Ref. [48] . . . . .	22
2.10. Representación esquemática del sistema estudiado. El perfil de potencial simula la situación en que dos hilos cuánticos están acoplados por una barrera de potencial. . . . .	24
2.11. Espectro de energía de los estados confinados para un único pozo cuántico. El ancho del pozo es $L = 200 \text{ nm}$ . La altura del potencial es $U_0 = 50 \text{ meV}$ . . . . .	30
2.12. Relación de dispersión para el caso que se considera el parámetro de masa $\beta = 10 \text{ meV}$ . Note que la presencia del parámetro de masa induce el desdoblamiento de las subbandas para el valor de $k_y = 0 \text{ nm}^{-1}$ . . . . .	30
2.13. Funciones de onda $\chi_A$ (líneas punteadas) y $i\chi_B$ (líneas continuas) para el cuarto estado excitado y un valor de $k_y = 0,03 \text{ nm}^{-1}$ . Note que estas funciones no reflejan simetría con respecto a la posición $x = 0$ . . . . .	31
2.14. Densidad de probabilidad relativa a la cuarta subbanda. Note que esta función refleja totalmente la simetría del sistema. . . . .	32
4.1. Estructura de banda del grafeno para el punto de Dirac $K$ . En esta figura consideramos las soluciones para los estados confinados, así como también estados de partícula libre. Note que energías positivas (negativas) están asociadas a la banda de conducción (Valencia). . . . .	36

- 4.2. Espectro de energía de los estados confinados para una estructura simétrica con anchos  $L_1 = L_2 = 14 \text{ nm}$  ancho de barrera  $L_0 = 4 \text{ nm}$ ,  $U_0 = 150 \text{ meV}$ . El parámetro  $\beta = 0 \text{ meV}$ , para todas las regiones del potencial confinador. 36
- 4.3. Densidad de probabilidad correspondiente a los mismos parámetros de la estructura en la Figura 4.2, para (a)  $n = 1$ , (b)  $n = 2$ , (c)  $n = 3$ , (d)  $n = 4$ , subbandas. Las líneas verticales indican las interfaces del potencial confinador. Note además, que la presencia de estados extendidos para  $n = 3$  y  $n = 4$  es evidente (puntos rojos) . . . . . 38
- 4.4. Densidad de probabilidad para una estructura en la que la anisotropía espacial es evidente. Los parámetros de esta estructura son  $L_1 = 12 \text{ nm}$ ,  $L_2 = 14 \text{ nm}$ ,  $L_0 = 4 \text{ nm}$  y  $U_0 = 150 \text{ meV}$ . Es evidente que existe una fuerte localización de la función densidad de probabilidad en el pozo de largura  $L_2$ . Note además, que la amplitud de la función alcanza su máximo valor cuando el vector de onda  $k_y \rightarrow 0$ . . . . . 39
- 4.5. Variación de los mínimos asociados a la energía (velocidad de grupo) debido a la anisotropía espacial generada en la estructura: (a) Muestra la destrucción del mínimo en la energía para la primera subbanda (color negro), cuando la anisotropía espacial es mas evidente (color verde). (b) Destrucción del mínimo de la segunda subbanda. . . . . 40
- 4.6. Modos de energía de los estados confinados para una estructura en la cual el parámetro  $\beta = 40 \text{ meV}$ , el ancho de los pozos, barrera y altura del potencial fueron los mismos del caso que generó la Figura 4.2. Note también que este parámetro de masa suprime la presencia de los estados extendidos en la estructura, y provoca un desdoblamiento das subbandas para el valor de  $k_y = 0$ . . . . . 42
- 4.7. Intensidad de la densidad de probabilidad correspondiente a la estructura en la Figura 4.6. Note que la principal diferencia entre estas figuras se encuentra para  $n = 3$  y  $n = 4$  donde los colores a lo largo de la estructura son suprimidos. Es claro que la presencia del parámetro de masa acaba con los estados extendidos. . . . . 44

- 4.8. Variación de la velocidad de grupo debido al parámetro de anisotropía de masa  $\Delta = 0, 10, 20, 30, 40 \text{ meV}$ , (de arriba para abajo), respectivamente. (a) Muestra tal efecto para la primera subbanda. (b) Muestra el efecto en la segunda subbanda. Los parámetros de la estructura son asumidos siendo  $L_1 = L_2 = 9 \text{ nm}$ ,  $L_3 = 4 \text{ nm}$  e  $U_0 = 150 \text{ meV}$ . . . . . 45
- 4.9. Variación de la velocidad de grupo debido a la anisotropía generada en el parámetro de masa  $\Delta = -10, 0, 10, 20, 30 \text{ meV}$ , (de arriba para abajo), respectivamente. (a) Muestra el efecto para la primera subbanda. (b) Efecto en la segunda subbanda. El ancho de los pozos, y barrera así como la altura del potencial son los mismos de la Figura (4.8). Las líneas oblicuas sólidas (punteadas) indican los límites de los estados confinados para  $\Delta < 0$  ( $\Delta \geq 0$ ). . . . . 46
- 4.10. Intensidad de la función de densidad de probabilidad para las cuatro primeras subbandas. (a)  $n = 1$ , (b)  $n = 2$ , (c)  $n = 3$ , y (d)  $n = 4$ . La estructura es constituida por los parámetros  $L_1 = L_2 = 15 \text{ nm}$ ,  $L_3 = 4 \text{ nm}$  y  $U_0 = 150 \text{ meV}$ . Las líneas verticales indican las interfaces del potencial confinador. . . 47

# Capítulo 1

## Introducción

En las últimas décadas, las investigaciones teóricas y experimentales en nanoestructuras, basadas en semiconductores, han contribuido al desarrollo de nuevas tecnologías y nuevos dispositivos electrónicos basados principalmente en el silicio [1]. En la actualidad, estos dispositivos electrónicos se están acercando a sus límites de miniaturización y de eficiencia [2, 3], de modo que nuevos materiales están siendo utilizados en las aplicaciones de la micro y nanotecnología. En ese sentido, los materiales basados en el carbono han atraído mucho el interés de la comunidad científica, debido a que el carbono posee diferentes estados cuánticos (hibridizaciones) con lo cual diferentes tipos de cristales se pueden producir como el diamante y el grafito. Aunque el diamante es un alótropo del carbono, es importante mencionar que es muy diferente a las otras formas alotrópicas del carbono. El diamante tiene una estructura tridimensional constituida por fuertes enlaces  $\sigma$ , motivo por el cual es uno de los materiales más duros en la naturaleza. Además como no posee enlaces tipo  $\pi$ , el diamante es un aislante eléctrico [4].

Por otro lado, desde que se publicó el primer trabajo en el cual se reportó la existencia del grafeno (una única capa de grafito) [5], se puso de manifiesto la posibilidad de controlar, con mucha facilidad, la densidad de portadores de carga (flujo de electrones) en este material apenas por la aplicación de una pequeña diferencia de potencial, con lo que este material se tornó muy prometedor en el diseño de nuevos dispositivos electrónicos. Antes de comprobar la existencia del grafeno, la formación de los nanotubos de carbono, los cuales poseen una topología unidimensional (1D) [6], era posible a partir de la formación de

tabos de esta única capa de grafito. Además, la formación de una estructura esférica a partir del grafito, conocido como fullereno [7], puede considerarse como una estructura cero-dimensional (0D). Sin embargo, desde el descubrimiento de estos materiales la estructura del alótropo de carbono en dos dimensiones (2D), grafito, intrigaba a la comunidad científica.

En 1947, Phillip R. Wallace [8] hizo un estudio teórico de la estructura de bandas del grafito, considerando que los enlaces atómicos entre sus diferentes capas eran muy débiles en comparación con los enlaces atómicos de una misma capa. Por lo tanto, Wallace restringió su estudio teórico a un cristal 2D, es decir, se centró en el estudio teórico de la estructura de bandas del grafito. El enfoque de Wallace se basa en el hecho de que, tres de los cuatro electrones de valencia del carbono se hibridizan fuertemente en orbitales  $sp^2$  localizados en el plano  $x-y$ . Por otro lado, el cuarto electrón de valencia, se encuentra en un orbital  $p_z$ , perpendicular al plano. Así, esta estructura origina tres bandas enlazantes  $\sigma$  y tres antienlazantes  $\sigma^*$ . Mientras que los orbitales  $2p_z$ , aquellos que están débilmente enlazados, forman dos bandas  $\pi$  y  $\pi^*$ , llamadas de enlazantes y antienlazantes, que se degeneran en los seis puntos de alta simetría (K) de la primera zona de Brillouin (puntos de Dirac).

Por otro parte, 10 años antes de la teoría de Wallace, Landau y Peierls desarrollaron teorías en las que concluían que la formación de cristales 2D no era posible, puesto que estos cristales se tornarían termodinámicamente inestables [9]. Este argumento se basa en el hecho de que las fluctuaciones térmicas (fonones) en las redes cristalinas de baja dimensionalidad llevaría a la destrucción de este material 2D para temperaturas finitas [10]. Pronto este resultado fue cuestionado por Mermin [11] y obtenido en otras experimentos.

Sin embargo, en el año 2005, dos grupos de investigadores, el primero dirigido por Andre Geim (Premio Nobel de Física 2010) [5, 13] de la Universidad de Manchester y el segundo por Phillip Kim [14, 15] de la Universidad de Columbia, lograron aislar por primera vez, una única capa de grafito, el grafito. Estos experimentos fueron sorprendentes para los físicos teóricos que simpatizaban con el formalismo de Landau, Peierls, Mermin y Wallace. El procedimiento utilizado por estos grupos para obtener el grafito se basa en una técnica sencilla de exfoliación mecánica que consiste en colocar y remover sobre una

muestra de grafito una cinta adhesiva. Esta forma de preparación es debido a que a partir del grafito, el cual está formado por muchas capas de grafeno donde los enlaces atómicos entre las átomos de una misma capa, entre las átomos de las adyacentes capas, es posible obtener capas de grafeno adheridas en la cinta. Luego de obtener una muestra de grafito con pocas capas en la cinta adhesiva, procedieron a transferir la muestra a un sustrato de óxido de silicio. De esta manera, con la ayuda de un microscopio óptico refractivo, se pudo saber donde se encontraban las laminas de grafeno, pero no se podía confirmar cuántas capas de grafeno existían en la muestra. Para resolver esta problemática, utilizaron un microscopio de fuerza atómica (MFA) para medir la altura de la muestra. Así, pudieron comparar las diferentes alturas de las muestras con los tonos oscuros que el microscopio proporcionaba. Identificándose una única capa de grafito, el grafeno.

Debemos mencionar que la exfoliación mecánica no es una técnica exclusiva del grafito. El grupo de Minshu Chen informó que es posible obtener capas de varios otros cristales, como  $BN$ ,  $NbSe_2$ , y  $Bi_2Sr_2CaCu_2O_x$  [16].

Otra técnica para obtener grafeno, es el crecimiento epitaxial. Esta técnica consiste en hacer crecer un cristal de SiC y exponerlo a temperaturas altas ( $\approx 1200^\circ C$ ) para evaporar los átomos de Si que se encuentran sobre la superficie. De esta manera, los átomos de carbono que quedan en la superficie forman monocapas de grafeno. Esta técnica fue desarrollada por el grupo de Walt Heer de la Universidad de Atlanta, lo que permitió obtener el crecimiento de monocapas y bicapas de grafeno [18]. Contrariamente a la técnica de exfoliación mecánica, el sustrato de SiC, se considera como una parte fundamental del grafeno crecido epitaxialmente. Esto debido a que la capa de grafito crecida por primera vez durante el crecimiento está directamente en contacto con el sustrato de SiC. Además de esta propiedad, ha sido comprobado experimentalmente que el grafeno epitaxial muestra transporte balístico y una alta movilidad, característica que no presenta el grafeno exfoliado.

Por lo expuesto, podemos concluir que el grafeno es el primer cristal bidimensional (2D) estable, encontrando en la literatura. Asimismo, aparte de las aplicaciones tecnológicas que proporcionaría el grafeno, existen otras motivaciones, desde el punto de vista académico, para el estudio de este material. Al respecto podemos mencionar que los teóri-

mas razón que la existencia de cristales 2D era imposible. Esto debido a que en la teoría de Peierls-Landau se concluye que el orden de largo alcance en sólidos 2D no podría existir, ya que las fluctuaciones térmicas de fonones de baja energía destruyen al estado termodinámicamente inestable [20]. De hecho, años más tarde, la ausencia del orden de largo alcance fue mostrado rigurosamente por Mermin [11]. Sin embargo, en una publicación más reciente [21], se ha encontrado que la existencia del grafeno se debe únicamente a que este material en forma suspendida, posee ondulaciones que rompen la simetría traslacional del cristal, convirtiéndolo en un cristal 2D imperfecto y por lo tanto estable.

Los trabajos sobre grafeno, desde que fue obtenido en el laboratorio, se incrementaron rápidamente. Las razones de este aumento son variadas, ya que este material presenta fenómenos físicos muy interesantes en sistemas de bajas dimensiones y de altas energías. En este cristal bidimensional los portadores de carga se comportan como partículas relativistas sin masa, por esta razón, en este material una frontera de potencial no modifica el comportamiento de dichos portadores, es decir, el confinamiento a través de potenciales electrostáticos no es posible, este fenómeno es conocido en la literatura como el Efecto de Klein. Experimentos mostrando el efecto Hall cuántico han medido conductividades como siendo un múltiplo semi-entero de  $e^2/h$ , el cual puede ser observado únicamente a temperaturas muy bajas [13, 15, 23, 24]. Además, la dispersión cuántica entre la energía y el vector de onda hace que el grafeno se comporte como un semiconductor de Gap cero para bajas energías, por lo cual los electrones en este material se comportan como fermiones sin masa. Este último hecho hace posible que el grafeno sea un excelente candidato para poner a prueba los modelos teóricos de la teoría cuántica de campos que sólo podrían ser probados en altas energías. El grafeno por lo tanto, conecta una gran parte de la Física de la Materia Condensada y la Física de Altas Energías [25].

Por otro lado, propuestas para la aplicabilidad del grafeno incentivaron tanto investigaciones teóricas como experimentales en hilos de grafeno. Se trata de finas canales (uni-dimensionales) cortados a partir de grafenos mesoscópicos. Estos cortes son realizados a lo largo de una dirección cristalográfica, quedando así en dos tipos de bordas: (i) zig-zag y (ii) armchair. Trabajos teóricos mostraron que los hilos del tipo zig-zag se comportan como metales, mientras que los hilos del tipo armchair se pueden



comportar como semiconductores o metales dependiendo de las longitudes de los hilos. Estas predicciones teóricas fueron reportadas por primera vez por Fujita y Dresselhaus [26]. De esta forma, estos dos tipos de hilos de grafeno son considerados como candidatos para el desenvolvimiento de dispositivos electrónicos tales como transistores.

Por estas razones y con la finalidad de tener un mejor entendimiento sobre el comportamiento del grafeno, fijamos nuestra atención en el estudio teórico del espectro de una partícula independiente de los portadores de carga en el grafeno, es decir, despreciando las interacciones entre electrones, cuando el material es sometido a un confinamiento cuántico debido a un potencial electrostático. El objetivo inmediato es estudiar como algunos parámetros como la altura y el ancho de la barrera de potencial afecta la dinámica de los portadores de carga en este material.

El escenario de estudio son pozos cuánticos acoplados por una barrera de potencial, que son montados sobre un grafeno de alta calidad. Este arreglo permite hacer el estudio teórico de una partícula independiente usando la ecuación de Dirac. Efectos de anisotropía espacial en la estructura así como anisotropías inducidas por interacciones entre el grafeno con el sustrato serán estudiadas.

En el Capítulo 2, revisaremos el modelo teórico de la estructura electrónica del Grafeno usando la aproximación *Tight Binding* y considerando la contribución de los segundos vecinos. En particular, será discutido el límite donde el hamiltoniano *Tight Binding* reproduce la ecuación de Dirac 2D. Asimismo, introduciremos, sobre consideraciones de fenomenología, el parámetro relativo a la masa, importante en el estudio de sus propiedades, de las cuasi-partículas del grafeno. La comparación entre el modelo teórico y posibles realizaciones experimentales también es presentada.

En el Capítulo 3, presentamos como las ecuaciones obtenidas en el Capítulo II pueden ser usadas en el estudio del espectro de partícula independiente en hilos cuánticos acoplados y basados en grafeno. Se trata del cristal 2D sometido a potenciales electrostáticos que confinan los portadores a topologías unidimensionales. En este trabajo consideramos el caso general, en el cual, el parámetro de masa  $\beta$  es diferente, en caso contrario cuando el potencial es confinador. Cuantificaremos el comportamiento de los portadores de carga en la estructura a través de la densidad de probabilidad como función de este parámetro.

Finalmente en el Capítulo 4 estudiamos los efectos que la anisotropía espacial de la estructura tiene sobre los portadores de carga. En ese sentido, mostramos que entre los efectos que esta anisotropía induce se encuentran aquellos en el cual se puede encontrar mayor cantidad de portadores de carga en uno de los pozos. Sus efectos son también reflejados en la conductividad del material. Nuestros resultados muestran que cuando el ancho de las pozos son diferentes es posible acabar con la contribución de una dada subbanda sobre la conductividad. Resultados similares fueron mostrados para el caso en el cual existe anisotropía por parte del parámetro  $\beta$ .

Ciertamente, el estudio del espectro de partícula independiente realizado en este trabajo es el punto de partida para el estudio de un sistema más real en que se considere la interacción entre los electrones. En ese sentido, entre nuestras perspectivas se encuentran el estudio del espectro colectivo (*Plasmones*) de las cuasi-partículas en estas estructuras de topología reducida.

## Capítulo 2

# Fundamentos teóricos

### 2.1. El carbono y sus hibridaciones

El carbono, principal constituyente del grafito y del grafeno, es también el componente elemental de todas las moléculas orgánicas. Esto, lo convierte en el principal responsable de la vida en nuestro planeta [27]. Para poder entender las propiedades y la estructura electrónica de los alótropos de carbono, es importante discutir primero los estados electrónicos y los enlaces que el carbono posee. El carbono es el sexto elemento de la tabla periódica que pertenece al grupo IV y posee seis electrones. El carbono, forma dos tipos de isótopos estables  $^{12}\text{C}$  y  $^{13}\text{C}$  con una abundancia de 98.9% y 1.1% respectivamente [28].

En el estado atómico fundamental los seis electrones del carbono se encuentran en la configuración electrónica  $1s^2 2s^2 2p^2$ , lo que indica que dos electrones llenan completamente el orbital  $1s$  y están fuertemente ligados al núcleo atómico. Los cuatro electrones restantes que ocupan los orbitales  $2s$  y  $2p$ , están débilmente enlazados al núcleo y son llamados electrones de valencia. En la fase cristalina, los electrones de valencia dan origen a los orbitales  $2s$ ,  $2p_x$ ,  $2p_y$  y  $2p_z$  los cuales forman enlaces covalentes en los alótropos de Carbono [29]. Debido a que los orbitales  $2p$  son aproximadamente 4 eV más energéticos que los orbitales  $2s$ , entonces es mucho más probable encontrar dos electrones en el orbital  $2s$  y dos electrones en el orbital  $2p$  como muestra la Figura (2.1). Sin embargo, ante la presencia de otros átomos, tales como, H, O o C es posible promover un electrón del orbital  $2s$  al tercer orbital  $2p_z$ , para poder formar enlaces covalentes con los otros átomos.

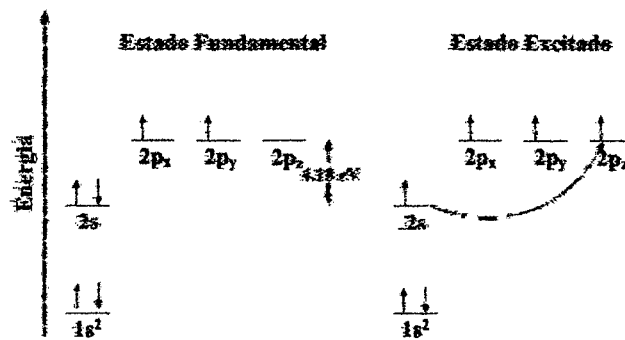


Figura 2.1: Esquema de la configuración electrónica para el átomo de carbono. Estado fundamental (derecha) y estado excitado (izquierda).

Esta reorganización de los orbitales atómicos  $2s$  y  $2p$  es llamada de hibridización.

En el carbono es posible la formación de hibridaciones del tipo  $sp$ ,  $sp^2$  y  $sp^3$  las cuales están asociadas a la unión de un único electrón del orbital  $2s$  con 1, 2 o 3 electrones del orbital  $2p$ , respectivamente. En el formalismo de la mecánica cuántica, la unión de los electrones de valencia puede ser descrita por la combinación lineal de cuatro estados cuánticos:  $|2s\rangle$ ,  $|2p_x\rangle$ ,  $|2p_y\rangle$  y  $|2p_z\rangle$ . Esta superposición de estados cuánticos será explicada a continuación.

### 2.1.1. Hibridización $sp$

La hibridización  $sp$  surge a partir de la superposición lineal del estado  $|2s\rangle$  con uno de los estados  $|2p_i\rangle$ , donde  $i = x, y, z$ . Para nuestra descripción teórica elegiremos el orbital  $|2p_x\rangle$ . De esta forma, los estados cuánticos de los orbitales hibridizados  $sp$ , representados por  $|sp_+\rangle$  y  $|sp_-\rangle$  están dados por

$$|sp_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s\rangle + |2p_x\rangle).$$

$$|sp_-\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|2s\rangle - |2p_x\rangle).$$

La densidad electrónica de estos orbitales hibridizados son mostrados en la figura (2.2-

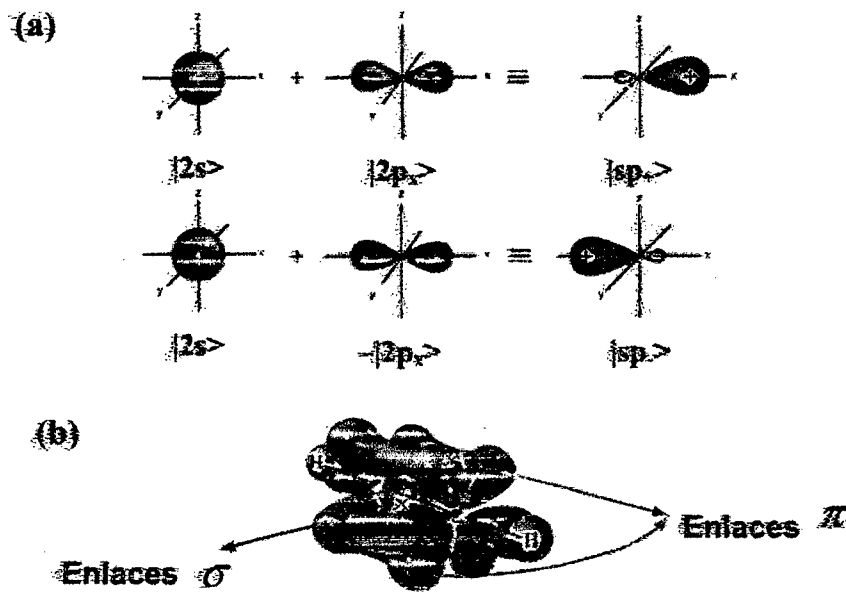


Figura 2.2: (a) Formación de los orbitales híbridos  $sp$ . (b) Molécula del acetileno, mostrando la formación de una ligación  $\sigma$  debido a los orbitales híbridos  $sp$  y la formación de dos enlaces  $\pi$  debido a los orbitales  $2p_y$  e  $2p_z$ . Imágenes adaptadas de las referencias [30, 31] respectivamente.

a). En dicha figura se muestra que el estado simétrico  $|sp_+\rangle$  es alargada en la dirección  $x$ , mientras que el estado antisimétrico  $|sp_-\rangle$  es alargada en la dirección  $-x$ . Este tipo de hibridización es apreciada en la formación de moléculas de acetileno  $H-C\equiv C-H$ , que es una molécula lineal. El orbital híbrido  $|sp_-\rangle$  de uno de los átomos de carbono de la molécula forma un fuerte enlace covalente con el orbital  $|sp_-\rangle$  del otro átomo de carbono. Este enlace es llamado de enlace  $\sigma$  y es mostrado en la Figura (2.2-b). Los dos orbitales  $2p$  restantes que son perpendiculares al enlace  $\sigma$ , forman enlaces débiles llamados de enlace  $\pi$ . Así, la molécula de acetileno posee un enlace  $\sigma$  y dos enlaces tipo  $\pi$ .

### 2.1.2. Hibridización $sp^2$

En la hibridización  $sp^2$  es posible la superposición del orbital  $2s$  con 2 orbitales  $2p$ . Así, escogiendo los estados  $|2p_x\rangle$  y  $|2p_y\rangle$  podemos obtener las funciones de onda de los orbitales híbridos  $sp^2$ , donde

$$|sp^2_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|2s\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|2p_x\rangle,$$

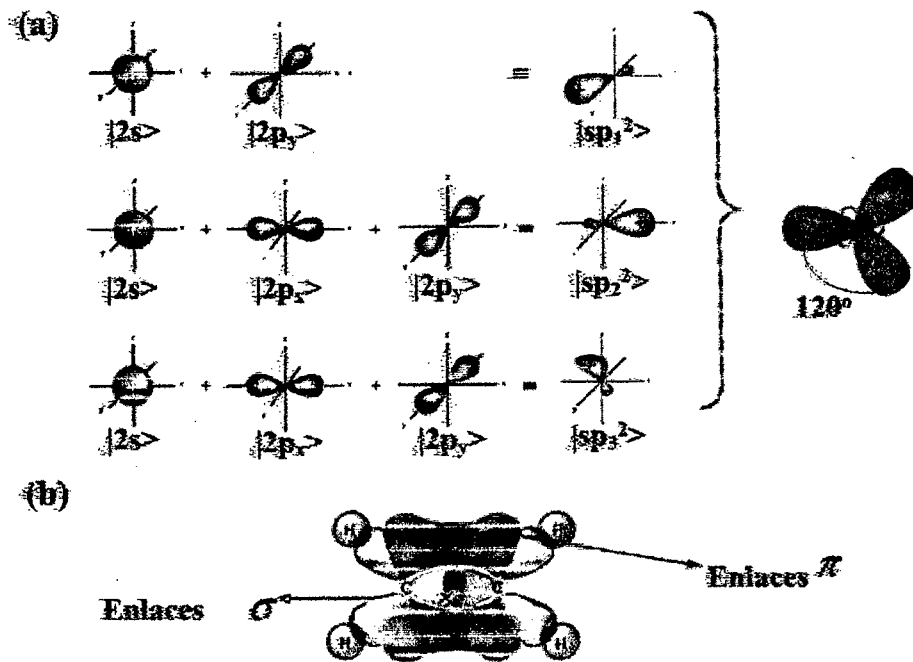


Figura 2.3: (a) Formación de los orbitales híbridos  $sp^2$ . Notese que estos orbitales cuando están juntos forman un ángulo de  $120^\circ$ . (b) Molécula de etano mostrando la formación de un enlace  $\sigma$  debido a los orbitales híbridos  $sp^2$ , y un enlace  $\pi$  debido al orbital no híbrido  $2p_z$ . Imágenes adaptadas de la referencia [30, 32].

$$|sp_1^2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|2s\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|2p_x\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}}|2p_y\rangle,$$

$$|sp_2^2\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}}|2s\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|2p_x\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}}|2p_y\rangle.$$

Los orbitales atómicos híbridos están orientados en el plano  $xy$  y forman un ángulo de  $120^\circ$  entre sí, como es mostrado en la figura (2.3-a). La molécula de etano  $C_2H_4$  es un buen ejemplo para ilustrar los enlaces  $sp^2$ . El etano posee un enlace doble entre los átomos de carbono el cual consiste en un enlace tipo  $\sigma$  originado a partir de dos orbitales  $|sp^2\rangle$  y un enlace tipo  $\pi$ , el cual surge del orbital  $|2p_z\rangle$ . Ver Figura (2.3-b).

### 2.1.3. Hibridización $sp^3$

Este tipo de hibridización se origina de la superposición de un orbital  $2s$  con 3 orbitales  $2p$ . Los estados cuánticos de los orbitales hibridizados están dados por:

$$|sp_1^3\rangle = \frac{1}{2}(|2s\rangle + |2p_x\rangle + |2p_y\rangle + |2p_z\rangle),$$

$$|sp_2^3\rangle = \frac{1}{2}(|2s\rangle - |2p_x\rangle - |2p_y\rangle + |2p_z\rangle),$$

$$|sp_3^3\rangle = \frac{1}{2}(|2s\rangle - |2p_x\rangle + |2p_y\rangle - |2p_z\rangle),$$

$$|sp_4^3\rangle = \frac{1}{2}(|2s\rangle + |2p_x\rangle - |2p_y\rangle - |2p_z\rangle).$$

Estos orbitales atómicos forman un ángulo de  $109,5^\circ$  y están orientados a través de una geometría tetragonal. Así, el diamante que surge de la condensación del carbono líquido a presiones altas posee este tipo de hibridización.

## 2.2. Estructura electrónica del grafeno

Como fue visto en la sección anterior los átomos de carbono del Grafeno se hibridizan a través de enlaces del tipo  $sp^2$ , de manera que el cristal es formado por una red hexagonal. Además, una red de bravais en este material puede ser diseñada a través de dos sub redes triangulares  $A$  y  $B$ , como se muestra en la Figura (2.4). En el grafeno la distancia entre los átomos de carbono, dado por el parámetro de red cristalina, es aproximadamente  $a = 0,142 \text{ nm}$ , de manera que los vectores base de la red hexagonal pueden ser escritos como

$$\mathbf{a}_1 = a(\sqrt{3}, 0) \quad \text{y} \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 3). \quad (2.1)$$

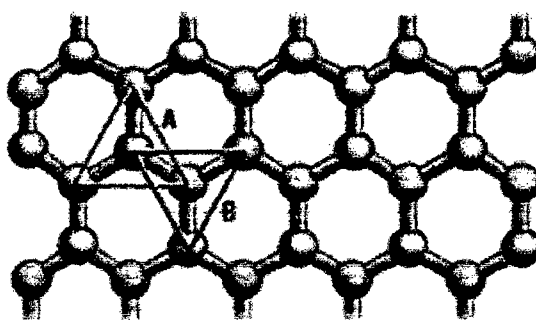


Figura 2.4: Representación esquemática de la red cristalina hexagonal de grafeno. La red es constituida por 2 átomos denominados como,  $A$  y  $B$ . Un átomo de la subred triangular de tipo  $A$  está ligado a 3 átomos de subred triangular de tipo  $B$ , y viceversa.

De este modo los vectores que unen un átomo  $A$  con sus primeros vecinos del tipo  $B$  son dados por [ver Figura (2.5-a)]

$$\mathbf{R}_1 = a\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right), \quad \mathbf{R}_2 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}, 1) \quad \text{y} \quad \mathbf{R}_3 = a(0, -1). \quad (2.2)$$

Asimismo, en el espacio recíproco [Figura 2.5(b)], esta red hexagonal tiene los siguientes vectores base:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(\sqrt{3}, -1) \quad \text{y} \quad \mathbf{b}_2 = \frac{4\pi}{3a}(0, 1). \quad (2.3)$$

En el centro de la primera Zona de Brillouin (ZB) indicada por la parte sombreada de la Figura 2.5 (b), se encuentra el punto  $\Gamma$ . Los vértices de la primera ZB son puntos de la red recíproca representados por los vectores de onda *no equivalentes*, cuyas coordenadas pueden ser escritas como

$$\mathbf{K} = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}(1, 0) \quad \text{y} \quad \mathbf{K}' = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}(-1, 0). \quad (2.4)$$

Estos puntos de simetría de la red recíproca son de grande importancia cristalográfica, debido a que las excitaciones de energías bajas son centradas en sus alrededores.

De esta manera, observamos que el grafeno es un cristal 2D formado por dos átomos por celda unitaria. Estos átomos son encontrados en dos sitios distintos de la red real:



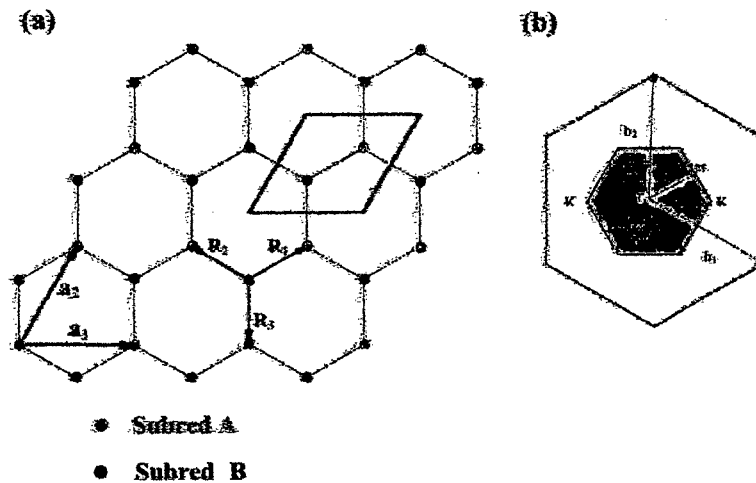


Figura 2.5: (a) Estructura cristalina del grafeno indicando los vectores base  $a_1$  y  $a_2$  que forman una red de Bravais, así como también las posiciones de los primeros vecinos del átomo de tipo  $B$ . (b) Red recíproca del cristal grafeno. La región oscura indica la primera Zona de Brillouin. Los puntos de alta simetría  $\Gamma$ ,  $K$  y  $M$  son indicados.

$A$  y  $B$ . En adelante, asumiremos que cuando el átomo del sitio  $A$  ( $B$ ) está enlazado a otros tres átomos del sitio  $B$  ( $A$ ), estos cuatro átomos forman una subred triangular  $A$  ( $B$ ). Estas subredes triangulares están entrelazadas, de manera que juntas forman la red hexagonal.

Es importante resaltar que en el grafeno, para cada átomo de carbono, tres electrones son responsables de la formación de enlaces covalentes  $\sigma$  fuertes. El cuarto electrón de valencia, aquel del orbital  $2p_z$ , es responsable por la formación de enlaces  $\pi$ . Los electrones que originan las ligaciones  $\pi$  son altamente deslocalizados. Estos electrones se comportan prácticamente como partículas libres, siendo en su mayoría los responsables por las propiedades electrónicas.

### 2.2.1. Modelo *Tight Binding* (TB) para 2 átomos por celda unitaria: Aplicación en el grafeno

El modelo *Tight Binding* fue propuesto por Bloch [33] en 1928 para describir estructuras de banda de sólidos cristalinos. Este modelo considera la construcción de las funciones de onda de la red cristalina escritas como una combinación lineal de las funciones de onda

de los orbitales atómicos. Esta función de onda de la red, para un único electrón en una banda dada, es escrita como

$$\phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \varphi_j(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad (2.5)$$

donde  $j = 1, \dots, n$ ;  $\mathbf{k}$  es el vector de onda;  $\mathbf{R}$  es la posición del átomo,  $N$  ( $\sim 10^{24}$ ) es el número total de átomos en la red;  $\varphi_j$  es la función de onda del  $j$ -ésimo orbital atómico en la celda unitaria y  $n$  es el número de átomos por celda unitaria. Cabe resaltar que la función de onda  $\phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  satisface el teorema de Bloch, reflejando la invariancia del estado cuántico frente a la traslación del vector  $\mathbf{R}$  [34–36].

Para el grafeno solamente los electrones de los orbitales  $2p_x$  contribuyen con las propiedades electrónicas del cristal [6, 29]. Como consecuencia, será necesario construir las funciones de Bloch solamente para tales orbitales. Esto implicará que el índice  $j$  esté restringido a los valores de  $j = A, B$ , donde  $A$  y  $B$  representan los dos átomos de la celda unitaria. Así, considerando los dos átomos por celda unitaria,  $A$  y  $B$ , las funciones de onda del sólido cristalino pueden ser expresadas como una combinación lineal de las funciones de Bloch en la forma

$$\psi_i(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sum_j C_{ij} \phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (2.6)$$

donde  $i, j = A, B$  y  $C_{ij}$  son los coeficientes que pueden ser determinados teniendo en cuenta que  $\psi_i(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  debe satisfacer naturalmente la ecuación de Schrödinger, es decir

$$\hat{H} |\psi_i\rangle = E_i(\mathbf{k}) |\psi_i\rangle, \quad (2.7)$$

donde  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ ;  $V(\mathbf{r} - \mathbf{R})$  es el potencial periódico de la red cristalina y  $m$  es la masa del portador de carga. A continuación, multiplicando la ecuación (2.7) por el bra  $\langle \psi_i |$  obtenemos que los autovalores pueden ser escritos como

$$E_i(\mathbf{k}) = \frac{\langle \psi_i | \hat{H} | \psi_i \rangle}{\langle \psi_i | \psi_i \rangle}. \quad (2.8)$$

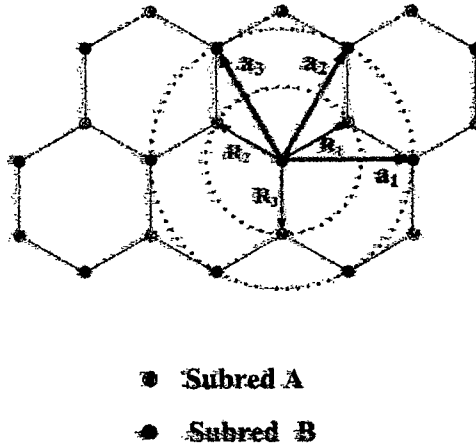


Figura 2.6: Red hexagonal de grafeno indicando las posiciones atómicas de los átomos vecinos. Los círculos indican los primeros y segundos vecinos del átomo de tipo B.

De esta manera, usando (2.6) en (2.8) y minimizando el valor de la energía, se encuentra el siguiente mínimo local,

$$\sum_{j=1}^2 H_{ij} C_{ij} = E_i(\mathbf{k}) \sum_{j=1}^2 S_{ij}(\mathbf{k}) C_{ij}, \quad (2.9)$$

en la cual,  $H_{ij} = \langle \psi_i | \hat{H} | \psi_j \rangle = \int \psi_i^* \hat{H} \psi_j dr$  son los elementos de la matriz llamada *matriz integral de transferencia*. similarmente,  $S_{ij} = \langle \psi_i | \psi_j \rangle = \int \psi_i^* \psi_j dr$  son los elementos de matriz llamada *matriz integral de overlap*.

En un primer momento, vamos a restringir las interacciones apenas para los primeros vecinos del átomo A (ver Figura 2.6). Note que los primeros vecinos del átomo A son átomos del tipo B. Por lo tanto, la *matriz integral de transferencia* es una matriz  $2 \times 2$ , cuyos elementos no diagonales  $H_{AB}$  son formados a partir de la interacción de los primeros vecinos del átomo de tipo A con los átomos del tipo B. Estos elementos pueden ser escritos en la forma

$$H_{AB} = (H_{BA})^* = t_0 f(\mathbf{k})^*, \quad (2.10)$$

donde el *hopping* isotrópico entre los primeros vecinos es dado por

$$t_0 = \langle \varphi_B(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{R}_1) | \hat{H} | \varphi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \rangle, \quad (2.11)$$

mientras que el término de *acoplamiento* por

$$f(\mathbf{k}) = (1 + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_3}. \quad (2.12)$$

Aquí la posición atómica de los segundos vecinos toma la forma del vector  $\mathbf{a}_3 = \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1$ .

Consideremos ahora las interacciones de los segundos vecinos del átomo A (ver Figura 2/6). Note que los segundos vecinos del átomo A son todos del tipo A, de manera que si denotamos las posiciones atómicas de estos 6 vecinos por los vectores  $\pm\mathbf{a}_1$ ,  $\pm\mathbf{a}_2$  y  $\mathbf{a}_3 = \pm(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1)$ , los elementos diagonales de la *matriz integral de transferencia* están dados por

$$\begin{aligned} H_{AA} = H_{BB} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}')} \langle \varphi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}') | \hat{H} | \varphi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \rangle, \\ &= \epsilon_{2p} + 2t_0 \sum_{i=1}^3 \cos \mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i = \epsilon_{2p} + t_0 (|f(\mathbf{k})|^2 - 3), \end{aligned} \quad (2.13)$$

donde  $\epsilon_{2p}$  es la energía característica de los enlaces  $\pi$ , siendo que el *hopping* isotrópico de segundos vecinos es

$$t_1 = \langle \varphi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{a}_1) | \hat{H} | \varphi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \rangle. \quad (2.14)$$

La energía de enlace  $\epsilon_{2p}$  representa una división en la estructura de banda, así la contribución de este término puede ser despreciado. También debemos mencionar que la contribución del término  $|f(\mathbf{k})|^2$  es mínima, de esta manera, la ecuación (2.13) puede ser escrita como

$$H_{AA} = H_{BB} = t_1 (|f(\mathbf{k})|^2 - 3) = t_{sv}, \quad (2.15)$$

es decir en el caso de simetría de las subredes se cumple que  $H_{AA} = H_{BB}$ .

A continuación hacemos un análisis de los elementos de la *matriz integral overlap*  $S_{ij}$ . Para esto, usando un procedimiento similar al anterior, escribimos

$$S_{AB} = s_0 f(k) \quad \text{y} \quad S_{AA} = 1, \quad (2.16)$$

donde  $s_0 = \langle \varphi_B(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{R}_i) | \varphi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \rangle$ . De esta forma, de acuerdo con la ecuación (2.9) y definiendo  $C_i = [C_{i1}, C_{i2}]^T$ , la siguiente ecuación de autovalores es obtenida

$$\tilde{H}C_i = E_j(k)\tilde{S}C_i, \quad (2.17)$$

a partir de la cual, para valores no nulos de la función de onda, se tiene la ecuación secular

$$\det \begin{bmatrix} t_{sv} - E(k) & (t_0 - s_0)f(k)^* \\ (t_0 - s_0)f(k) & t_{sv} - E(k) \end{bmatrix} = 0, \quad (2.18)$$

cuya solución permite conocer los autovalores, escritos en función del vector de onda  $k$ , dados por

$$E(k) = \frac{t_{sv} + \lambda t_0 |f(k)|}{1 + \lambda s_0 |f(k)|}. \quad (2.19)$$

Aquí el parámetro  $\lambda = 1(-1)$  hace referencia a la banda de conducción (valencia)  $\pi$ , ( $\pi^*$ ).

Debido a que el modelo se revela válido para describir las propiedades del grafeno para energías bajas, entonces se puede hacer una aproximación donde los parámetros  $s_0$  y  $t_{sv}$  sean muy pequeños, cuyo resultado se encontraría dentro de lo razonable. De esta forma, considerando  $s_0 \ll 1$  y  $t_{sv} \ll t_0$  en la ecuación (2.19), obtenemos la siguiente expresión simplificada:

$$E(k) = t'_{sv} |f(k)|^2 + \lambda t_0 |f(k)|. \quad (2.20)$$

Note que el parámetro de hopping  $t'_{sv} = (t_1 - \lambda t_0)$  fue renormalizado de tal forma que se puede omitir el término  $3t_1$ . Esta presunción fue hecha tomando en cuenta que

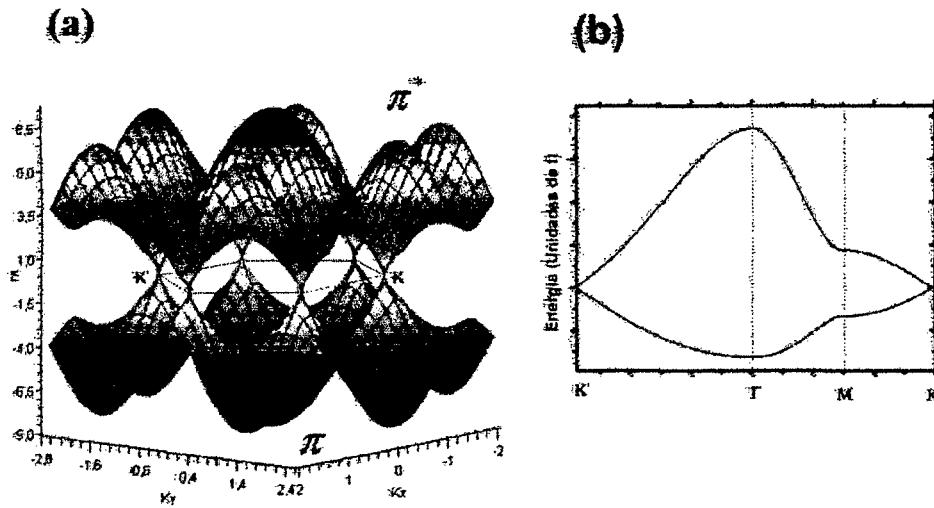


Figura 2.7: (a) Estructura de banda del grafeno obtenida de la aproximación *Tight Binding*, considerando los orbitales atómicos  $\pi$  y  $\pi^*$ . Note que las bandas  $\pi$  y  $\pi^*$  se interceptan en las 6 esquinas de la primera Zona de Brillouin. (b) Estructura de banda a lo largo de los puntos de alta simetría de la primera Zona de Brillouin. Note que en los alrededores de los puntos  $K$  la relación entre la energía y el vector de onda es lineal.

los efectos del término  $3t_1$  fueron considerados en el potencial químico [37, 38], lo cual no debe alterar los autovalores  $E(k)$ . Los valores del hopping  $t_0 = 3.033eV$  y  $t'_{sv} \approx 0.1t_0$  son encontrados en la literatura con un alto grado de precisión como consecuencia de usar métodos numéricos avanzados para la obtención de la estructura de bandas en sistemas de este tipo [39, 40]. De esta forma, estos valores justifican las aproximaciones adoptadas en esta sección.

En la Figura 2.7 se muestra el gráfico de la ecuación (2.20). Se trata de la dispersión de energía obtenido dentro de la aproximación *Tight-Binding*. Es posible distinguir las bandas de conducción ( $\pi$ ) y de valencia ( $\pi^*$ ). La energía de Fermi se encuentra localizada en la región donde las dos bandas se encuentran. Estos puntos son llamados de puntos de Dirac y son denotados por las letras  $K$  y  $K'$ . En el *apéndice A* mostramos que esos dos puntos no son equivalentes, a pesar que están situados en los mismos vértices de la primera zona de Brillouin. De la figura 2.7, también se observa que, si el hopping de segundos vecinos  $t'_{sv} = 0$ , la relación de dispersión  $E(k)$  es la misma tanto para huecos como para electrones, a menos de un signo. Existe por lo tanto una clara simetría entre la

bandas de valencia y de conducción. De este modo, es razonable concluir que el hopping a segundos vecinos  $t'_{sv} \neq 0$  quiebra la simetría existente.

### 2.2.2. Hamiltoniano efectivo para energías bajas: Ecuación de Dirac

De acuerdo con las ecuaciones (2.10) y (2.15), además de considerar la renormalización del hopping, el hamiltoniano *Tight-Binding* puede ser escrito como

$$H = t_0 \begin{bmatrix} 0 & f(k)^* \\ f(k) & 0 \end{bmatrix} + t'_{sv} |f(k)|^2 \hat{1} = H_0 + H_{sv}. \quad (2.21)$$

Los autoestados de este Hamiltoniano son encontrados en la literatura y se denominan pseudo-espinor  $\psi = [\phi_A, \phi_B]^T$ , cuyas componentes  $\phi_A$  y  $\phi_B$  representan las amplitudes de las funciones de Bloch en las subredes *A* y *B*, respectivamente. Note que si consideramos  $t'_{sv} = 0$ , obtenemos

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ \lambda e^{i\varphi_k} \end{bmatrix}, \quad (2.22)$$

donde  $\tan(\varphi_k) = \text{Im}[f(k)]/\text{Re}[f(k)]$ . Es importante notar, que a pesar que esta solución para el espinor es obtenida considerando  $t'_{sv} = 0$ , debemos comentar que el nuevo pseudo-espinor que es solución del Hamiltoniano *H* para el caso donde  $t'_{sv} \neq 0$  tiene una forma similar a la ecuación (2.22) donde el argumento de la exponencial tiene la dependencia del parámetro  $t'_{sv}$ .

Antes de escribir el espectro de las excitaciones para energías bajas y como una introducción del modelo teórico que se demostrará en la próxima sección debemos describir el hamiltoniano en la forma más general posible. De esta forma, escribimos el hamiltoniano como la contribución de tres tipos de energía, es decir

$$H = H_0 + H_{sv} + H_{gap} = t_0 \begin{bmatrix} 0 & f(k)^* \\ f(k) & 0 \end{bmatrix} + t'_{sv} |f(k)|^2 \hat{1} + \beta \hat{\sigma}_z. \quad (2.23)$$

Aquí el término  $\beta\hat{\sigma}_z$  surge de una generalización en la cual, la energía de sitio de los átomos de carbono son consideradas diferentes [41]. Por ejemplo, ocurre en el nitrato de boro (BN). Apesar que la red cristalina de este material es hexagonal, las energías de sitio del boro y del nitrógeno son diferentes [42,43]. Este mismo principio será considerado en el presente trabajo. Cabe resaltar que todos los átomos en el grafeno son de carbono, a medida que las muestras son llevadas al sustrato, las energías de sitio de los átomos de carbono pueden ser diferentes, debido a impurezas o vacancias en la red cristalina [44,45].

Con la intención de estudiar el espectro de energías en el límite de energías bajas, el término de acoplamiento  $f(k)$  será expandido alrededor de los llamados puntos de Dirac  $K$  y  $K'$ . De esta manera, siendo  $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{q}$ , hacemos la expansión de la ecuación (2.20) considerando que el vector de onda  $\mathbf{q}$  sea pequeño. Así, a partir de la ecuación (2.12) no es difícil llegar, tomando en cuenta la contribución de los términos de primera orden de  $\mathbf{q}$ , a la siguiente expresión:

$$f(k) \approx \frac{\sqrt{3}}{2} at_0(q_x + iq_y). \quad (2.24)$$

Para más detalles vea el apéndice B. Además, definiendo  $\frac{\sqrt{3}}{2} at_0 = \hbar v_f$ , donde  $v_f$  es la velocidad de Fermi, se puede escribir el hamiltoniano efectivo como

$$H = \hbar v_f \begin{bmatrix} 0 & q_x - iq_y \\ q_x + iq_y & 0 \end{bmatrix} + t'_{sv} \frac{9\alpha^2}{4} |\mathbf{q}|^2 \hat{1} + \beta\hat{\sigma}_z. \quad (2.25)$$

Note que en esta última expresión cuando  $t'_{sv} = 0$  se puede obtener

$$H = v_f \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + \beta\sigma_z, \quad (2.26)$$

donde  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$  son las matrices de Pauli y  $\mathbf{p}$  es el operador momento lineal. También, observe que esta última ecuación tiene la misma forma de la conocida ecuación relativista de Dirac 2D, dada por

$$H_{2D} = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + mc^2\sigma_z, \quad (2.27)$$



con  $m$  siendo la masa de las partículas relativistas.

Antes de continuar, es conveniente hacer una comparación entre las ecuaciones (2.26) y (2.27). Note que en el Hamiltoniano (2.26) la velocidad de Fermi,  $v_f$ , puede ser interpretada como aproximadamente 300 veces menor que la velocidad de la luz en el vacío  $c$ . Por otro lado, el término  $\beta$  en la ecuación (2.26) proviene de la diferencia entre las energías de sitio, y puede ser interpretado como siendo un término del tipo  $mc^2$  en la ecuación (2.27). Esta analogía permite interpretar el término  $\beta$ , como un parámetro de masa. Dada la semejanza, en adelante denominaremos a  $\beta$  como el parámetro de masa, que se origina de la interacción entre el sustrato y el material.

### 2.2.3. Caracterización experimental de la estructura de banda

La principal técnica experimental para estudiar la estructura de banda de los sólidos cristalinos es la espectroscopía de fotoemisión angularmente resuelta, El *ARPES* en su sigla en inglés. El *ARPES* está basado en el principio del efecto fotoeléctrico. Los electrones son expulsados de un material cuando un cuanto de energía es absorbido. La energía del fotón  $h\nu$ , absorbida por el electrón, supera la energía de enlace del sólido,  $E_{ent}$ , y permite su expulsión. De esta forma, la conservación de energía permite escribir

$$h\nu = E_{cin} + E_{ent} + W, \quad (2.28)$$

donde  $W$  es la función de trabajo característica de cada material y  $E_{cin}$  es la energía cinética ganada por el electrón. El objetivo es determinar la  $E_{ent}$  a partir de la ecuación (2.28).

La Figura (2.8) muestra el arreglo esquemático del experimento de *ARPES*. La magnitud del momento del electrón fotoemitido está dada en función de su energía cinética  $p = \sqrt{2mE_{cin}}$ . Para un cristal bidimensional, el momento es reducido apenas para la componente en el plano 2D, es decir,  $p_{||} = \sqrt{2mE_{cin}} \sin \theta$ , siendo  $\theta$  el ángulo con el cual el electrón fotoemitido es detectado. Así, el experimento de *ARPES* detecta la dirección y la energía del electrón fotoemitido. Para diferentes direcciones, se obtiene la dependencia entre la energía y el momento, es decir, la relación de dispersión.

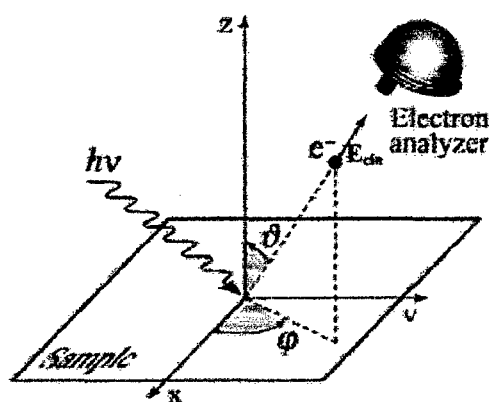


Figura 2.8: Representación esquemática de un experimento de ARPES. El analizador detecta los electrones fotoemitidos. Estos electrones poseen una cantidad de movimiento que es función de los ángulos polares e azimutales. Adaptada de la Ref. [46]

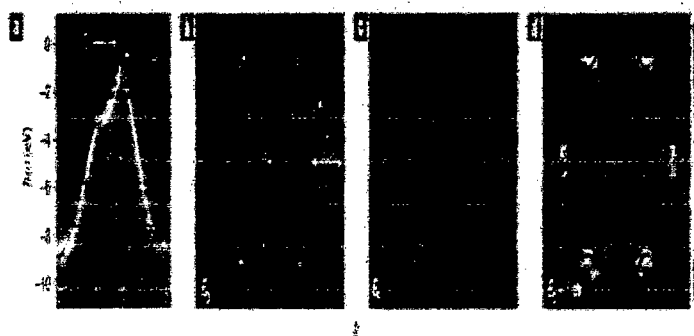


Figura 2.9: Resultados experimentales, de medidas de relación de dispersión usando *ARPES* sobre una muestra de grafeno epitaxial. (a) Estructura de banda a lo largo de los puntos de alta simetría. (b) Primera Zona de Brillouin (PZB). (c) PZB para los puntos de Dirac. (d) PZB para un grafeno dopado. Adaptada de la Ref. [48]

La primera medida de *ARPES* en una muestra de grafeno fue hecha por un grupo de investigadores de la Universidad de Berkley [47]. Ellos mostraron por primera vez la linealidad de la relación de dispersión. Otras medidas de *ARPES* fueron hechas por otros grupos desde entonces [48–50]. Aquí, presentaremos solamente los resultados obtenidos en la Ref. [48]. Este grupo realizó el experimento en una única capa de grafeno epitaxial dopado con átomos de potasio. En la Figura (2.9-a) se muestra la estructura de banda del grafeno para la banda de valencia  $\pi$ , la cual está en total concordancia con el modelo

teórico *Tight Binding* (ver Figura (2.7)). Por otro lado, la Figura (2.9-b) muestra la primera ZB correspondiente a los puntos de Dirac. Finalmente en las Figuras (2.9-c) y (2.9-d) se muestran la primera ZB para las energías de Fermi  $E_F = (E_D + 0.45)eV$  y  $E_F = (E_D - 1.0)eV$ , respectivamente. Estos resultados experimentales confirman claramente las predicciones teóricas.

## 2.3. Pozos cuánticos basados en grafeno

En esta sección iniciaremos el estudio del espectro de una partícula independiente en pozos cuánticos basados en grafeno. En ese sentido, el material se encontrará sobre la acción de un potencial electrostático en una determinada dirección. De esta manera, proponemos resolver analíticamente la ecuación de Dirac 2D en la presencia de un potencial confinador en apenas una dirección. Mostraremos también que las condiciones de contorno sobre las funciones de onda implican la continuidad de cada componente del pseudo-espinor, pero no de su derivada. Así, las condiciones sobre las cuales los estados confinados son encontrados pueden ser también estudiados.

Abordaremos un modelo teórico en el cual se investigará casos más generales que los estudiados previamente en la literatura [51–53]. El perfil de potencial propuesto permitirá estudiar los efectos de la anisotropía espacial, que puede controlar, a la vez, la dinámica de los portadores de carga en la estructura. También asumiremos valores diferentes para el parámetro fenomenológico  $\beta$  en diferentes regiones de la muestra en estudio. Como fue mencionado previamente estos efectos pueden ser atribuidos a la interacción entre el grafeno y el sustrato donde es crecido.

### 2.3.1. Descripción del modelo teórico

Como ya fue discutido en la sección anterior, los portadores de carga en el grafeno se comportan como un gas 2D. Para establecer la notación, consideraremos que el confinamiento de los portadores de carga ocurre en el plano  $x$ - $y$ , y que existe un potencial de confinamiento extra, solamente en la dirección  $x$ ,  $U(x)$ . Así, los portadores de carga de nuestro modelo teórico se mueven libremente a lo largo de la dirección  $y$  que será llamada

de ahora en adelante de dirección del hilo cuántico. Podemos entender estos potenciales como siendo los del tipo de contacto, o mejor, potenciales electrostáticos que pueden modelar una situación en que dos hilos cuánticos de anchos  $L_1$  y  $L_2$  estarían acoplados a través de una barrera de potencial de ancho  $L_b$  y altura  $U_0$ , como es mostrado en la Figura (2.10).

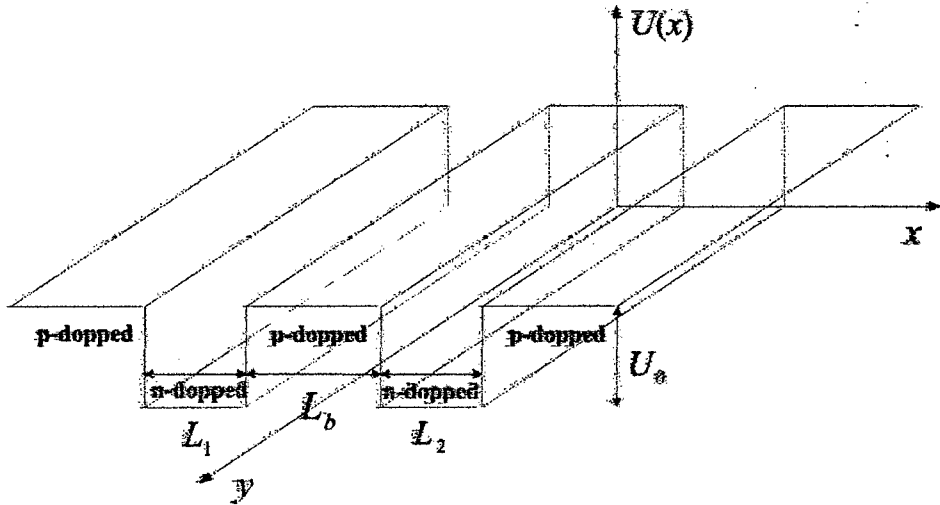


Figura 2.10: Representación esquemática del sistema estudiado. El perfil de potencial simula la situación en que dos hilos cuánticos están acoplados por una barrera de potencial.

De esta forma, el hamiltoniano efectivo de la ecuación (2.25), en la presencia del potencial  $U(x)$ , indicado en la Figura(2.10) assume la siguiente forma:

$$H = \gamma \begin{bmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{bmatrix} + \beta \sigma_z + U(x) \hat{1}, \quad (2.29)$$

donde  $\gamma = \hbar v_f \approx 0,539 eV \cdot nm$  para el grafeno. Este valor para  $\gamma$  está relacionado, con el valor del *hopping* para primeros vecinos, y es encontrado a través de métodos sofisticados para el cálculo de estructura de bandas [54]. Note que el término que caracteriza el *hopping* relativo a los segundos vecinos  $t'_{sv} = 0$ . El presente trabajo estará limitado a dicha aproximación. Como fue mencionado en la sección anterior el parámetro fenomenológico  $\beta = mv_f^2$  representa la diferencia de energías relativas a los sitios de cada átomo de la

celda unitaria. Así, las autofunciones para este hamiltoniano tienen componentes para los pseudo-espinores diferentes de cero y son expresados de la forma

$$\psi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{ik_y y} \begin{bmatrix} \chi_A(x) \\ \chi_B(x) \end{bmatrix}, \quad (2.30)$$

donde  $k_y$  es el vector de onda en la dirección del hilo. Notese la relación entre las componentes del pseudo-espinor  $\chi_A(x)$  y  $\chi_B(x)$  con las subredes A y B, respectivamente. Considerando esta función de onda como la solución de la ecuación secular  $H\psi = E\psi$ , es posible escribir un sistema de dos ecuaciones diferenciales acopladas, dadas por

$$-i\gamma \frac{d\chi_A}{dx} + i\gamma k_y \chi_A = (E - U(x) + \beta)\chi_B, \quad (2.31)$$

$$-i\gamma \frac{d\chi_B}{dx} - i\gamma k_y \chi_B = (E - U(x) - \beta)\chi_A. \quad (2.32)$$

Para encontrar el espectro de energías de la ecuación (2.29), tenemos que resolver primero las ecuaciones (2.31) y (2.32). Sin embargo, haciendo algunos cálculos algebraicos es posible desacoplar y obtener la siguiente ecuación diferencial de segunda orden:

$$\frac{d^2 \chi_u}{dx^2} + \frac{U'(x)}{(E - U \pm \beta)} \frac{d\chi_u}{dx} - \{k_y^2 - \gamma^{-2}[(E - U)^2 - \beta^2] \pm \frac{U'(x)}{(E - U \pm \beta)} k_y\} \chi_u = 0, \quad (2.33)$$

donde el subíndice  $u = A, B$ . Aquí,  $U'(x)$  es la derivada del potencial y el signo  $+$  ( $-$ ) está asociado a la subred A (B). También, observe que la solución para esta ecuación diferencial es del tipo exponencial, en la cual los argumentos pueden ser números reales o complejos. El tipo de soluciones dependerá del signo del último término de la ecuación (2.33). Así, debido a que el sistema en estudio está constituido por pozos y barreras de potencial, podemos proponer funciones de onda para cada región indicada en la figura (2.10) y que satisfagan la Ec. (2.33). Esto último será discutido a continuación.

### 2.3.2. Funciones de onda para los estados confinados

Consideremos que las componentes del pseudo-espinor  $\chi_A(x)$  y  $\chi_B(x)$  puedan ser de 3 tipos diferentes [51, 55]:

- i) Ondas planas que describan electrones y huecos, así como también estados mixtos. Estos últimos, originados debido a la recombinación de los electrones y los huecos en las interfaces del potencial, proporcionando un tunelamiento resonante que Klein ya había estudiado anteriormente usando la ecuación de Dirac [56, 57];
- ii) Ondas estacionarias en las regiones de los pozos, que surgen para determinados valores del vector de onda  $k_y$ , y decaen exponencialmente en las regiones de las barreras;
- iii) Ondas de tunelamiento, caracterizadas de manera más general por funciones exponenciales que poseen argumentos complejos en las regiones que se encuentran fuera de los pozos. Por otro lado, en las regiones que se localizan dentro de los pozos, las funciones están caracterizadas por combinaciones lineales de exponenciales con argumentos puramente reales. Estas soluciones pueden ser interpretadas como siendo aquellas que describen el tunelamiento ordinario a través de las regiones de la barrera.

Ya que nuestro objetivo es estudiar el espectro de los estados confinados en regiones trabajar con las soluciones del tipo (ii). Estas soluciones son válidas para un determinado intervalo de energía en el cual los estados resonantes de tunelamiento (de Klein) no están permitidos. Así, a través de este tipo de soluciones, suprimiremos el tunelamiento de Klein. De esta manera, la componente  $\chi_A(x)$  puede ser escrita de la siguiente forma para cada región estudiada:

$$\chi_A(x) = \begin{cases} e^{\kappa x} & \text{región I,} \\ B_2 \sin q_{II} x + C_2 \cos q_{II} x & \text{región II,} \\ D_3 e^{\kappa_3 x} + E_3 e^{-\kappa_3 x} & \text{región III,} \\ F_4 \sin q_{IV} x + G_4 \cos q_{IV} x & \text{región IV,} \\ H_5 e^{-\kappa x} & \text{región V,} \end{cases} \quad (2.34)$$

donde  $B_2, D_2, F_4$  y  $H_5$  son las amplitudes de probabilidad de transmisión,  $C_2, E_2$  y  $G_4$  son las amplitudes de probabilidad de reflexión, en la cual

$$q_{II} = \gamma^{-1} \sqrt{E^2 - (\gamma k_y)^2 - \beta_{II}^2} \quad \text{y} \quad q_{IV} = \gamma^{-1} \sqrt{E^2 - (\gamma k_y)^2 - \beta_{IV}^2}, \quad (2.35)$$

son los vectores de onda en las regiones *II* y *IV*, respectivamente, es decir, las regiones de los pozos cuánticos. Estos vectores de onda tienen la misma expresión, apenas con la diferencia entre los términos fenomenológicos  $\beta_{II}$  y  $\beta_{IV}$ . En nuestros cálculos, también asumiremos que las regiones *I*, *III* y *V* tienen diferentes valores para el parámetro  $\beta$ . De esta manera, escogemos que

$$k_x = \gamma^{-1} \sqrt{(\gamma k_y)^2 - (E - U_0)^2 + \beta_I^2}, \quad (2.36)$$

represente el vector de onda en las regiones *V* y *I*, de la estructura. Note que aquí consideramos por simplicidad que el parámetro  $\beta_I = \beta_V$ , lo que indica que en estas dos regiones la interacción entre sustrato y material es la misma. También definimos el vector de onda

$$k_b = \gamma^{-1} \sqrt{(\gamma k_y)^2 - (E - U_0)^2 + \beta_{III}^2}, \quad (2.37)$$

donde,  $\beta_{III}$  es el parámetro de masa en la región *III*. Estos vectores de onda fueron naturalmente obtenidos a través de la substitución de las soluciones de  $\chi_A(x)$  en la ecuación (2.33). Note que para encontrar los vectores de onda, ecuaciones (2.35-2.37), que contribuyen al confinamiento de los portadores de carga es preciso conocer primero la relación de dispersión  $E(k_y)$ .

Por otro lado, las soluciones analíticas para la componente  $\chi_B(x)$  son calculadas de manera análoga y mostradas en el apéndice C.

### 2.3.3. Condiciones de contorno

Las condiciones de continuidad son obtenidas de la relación de dispersión  $E(k_y)$  para nuestro sistema. Así, note que la continuidad de la función, Ec. (2.30), a lo largo de toda

la estructura debe ser requerida, es decir:

$$\chi_{\mu}^I(x_0) = \chi_{\mu}^{II}(x_0); \quad \chi_{\mu}^{II}(x_1) = \chi_{\mu}^{III}(x_1); \quad \chi_{\mu}^{III}(x_2) = \chi_{\mu}^{IV}(x_2); \quad \chi_{\mu}^{IV}(x_3) = \chi_{\mu}^V(x_3), \quad (2.38)$$

donde  $x_i$  ( $i = 0, 1, 2, 3$ ) son las coordenadas de cada interfase siendo que el super-índice indica la función  $\chi_{\mu}(x)$  en una determinada región del potencial confinador.

Al respecto de la continuidad de la derivada de la función de onda en cada interfase, es importante comentar e interpretar en base a la ecuación (2.33). Así, integrando ambos lados de la ecuación (2.33) en un intervalo pequeño alrededor de las interfaces  $x_i$  del potencial, es decir, los límites de integración serán establecidos en los puntos  $x_i - \delta$  y  $x_i + \delta$ , donde  $\delta$  es una variación infinitesimal, tenemos

$$\int_{x_i-\delta}^{x_i+\delta} \left[ \frac{d^2 \chi_u}{dx^2} + \frac{U'(x)}{(E-U \pm \beta)} \frac{d\chi_u}{dx} \right] dx - \int_{x_i-\delta}^{x_i+\delta} (k_y^2 - \gamma^{-2}[(E-U)^2 - \beta^2]) \chi_u dx \pm \frac{U'(x)}{(E-U \pm \beta) k_y} \chi_u dx = 0. \quad (2.39)$$

Note que debido a que la función  $U(x)$  es abrupta en cada interfase, podemos considerar su derivada como siendo una función delta de Dirac, de manera que podemos efectuar la integral llegando a la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} & \frac{d\chi_u}{dx} \Big|_{x_i+\delta} - \frac{d\chi_u}{dx} \Big|_{x_i-\delta} + \frac{1}{(E-U \pm \beta)} \left[ \frac{d\chi_u}{dx} \pm k_y \chi_u \right] \Big|_{x_i-\delta} \\ & = \int_{x_i-\delta}^{x_i+\delta} (k_y^2 - \gamma^{-2}[(E-U)^2 - \beta^2]) \chi_u dx, \end{aligned} \quad (2.40)$$

que en el límite  $\delta \rightarrow 0$ , es dado por

$$\frac{d\chi_u}{dx} \Big|_{x_i+\delta} = \left[ 1 - \frac{1}{(E-U_0 \pm \beta)} \right] \frac{d\chi_u}{dx} \Big|_{x_i-\delta} \mp \frac{k_y}{(E-U_0 \pm \beta)} \chi_u. \quad (2.41)$$

Como se quería demostrar la existencia del segundo término del lado derecho de la



ecuación (2.41) no permite que la derivada de los pseudo-espinores sean continuas en las interfaces. De esta forma, la condición de continuidad en cada interfase debe ser impuesta apenas sobre los pseudo-espinores  $\chi_A(x)$  y  $\chi_B(x)$ .

Con el conocimiento de las condiciones de continuidad en las cuatro interfaces podemos obtener un conjunto de 8 ecuaciones que, escritas apropiadamente, representan una matriz  $M$  de dimensión  $8 \times 8$ , cuyo determinante (ver apéndice D) es

$$\det[M] = 0. \quad (2.42)$$

A través de esta condición podemos obtener analíticamente una ecuación trascendental, cuya solución numérica proporciona la relación de dispersión  $E(k_y)$  del sistema. De esta manera, las funciones de onda de la Ec. (2.30) son fácilmente obtenidas a través de la substitución de los valores de los vectores de onda.

### 2.3.4. Espectro de energía

Con el objetivo de probar la efectividad de nuestros cálculos, estudiaremos a continuación un caso particular de la estructura, imponiendo que  $L_b = 0$ , es decir, vamos a determinar el espectro de los estados confinados para un pozo de grafeno. Este sistema ya fue estudiado previamente en la literatura [51]. De esta manera, en la Figura (2.11) mostramos la relación de dispersión  $E(k)$ , (espectro de partícula independiente-curvas continuas) para un hilo cuántico de ancho  $L = 200 \text{ nm}$ . La altura de la barrera fue asumida como  $U_0 = 50 \text{ meV}$  y el parámetro fenomenológico  $\beta = 0$  para todas las regiones. Sobre estas condiciones, conseguimos identificar hasta 15 subbandas de energía. Las líneas punteadas corresponden a los portadores de carga con energía  $E = \gamma|k_y| + U_0$ . Por otro lado, la región del espectro mostrada en la Figura (2.11) se encuentra limitada por la línea discontinua inferior, que representa los portadores de carga con energía  $E = \gamma k_y$ . Es importante enfatizar que todos aquellos estados que existen fuera de la región limitada por las líneas mencionadas corresponden a estados donde tanto los electrones como los huecos se mueven libremente a través de la estructura. Esto será discutido mejor en el capítulo 4.

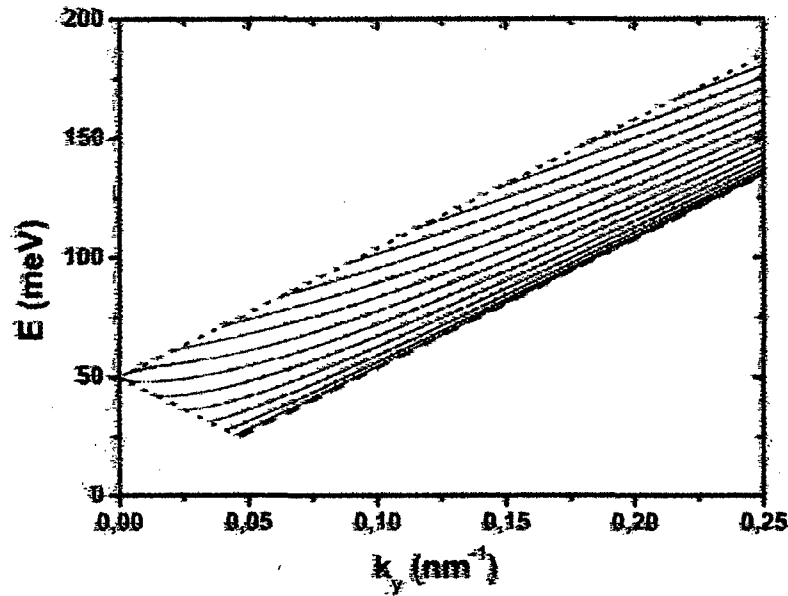


Figura 2.11: Espectro de energía de los estados confinados para un único pozo cuántico. El ancho del pozo es  $L = 200 \text{ nm}$ . La altura del potencial es  $U_0 = 50 \text{ meV}$ .

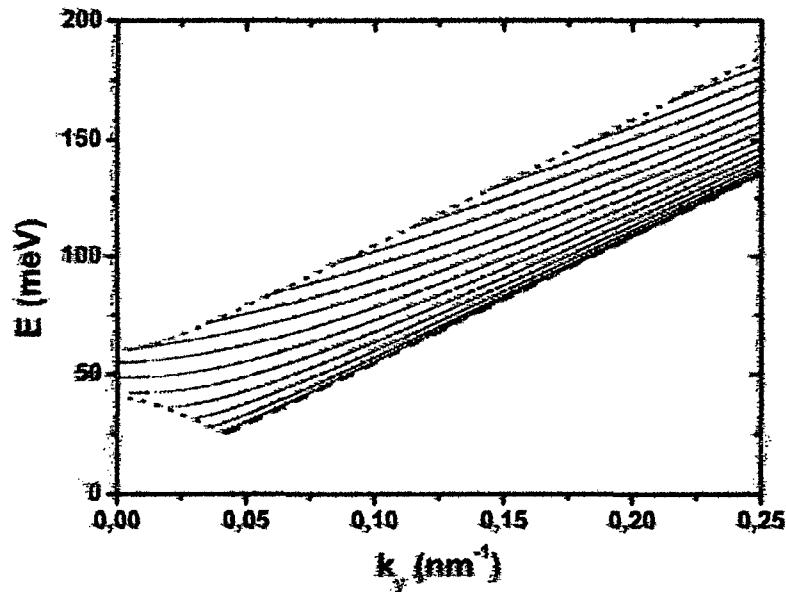


Figura 2.12: Relación de dispersión para el caso que se considera el parámetro de masa  $\beta = 10 \text{ meV}$ . Note que la presencia del parámetro de masa induce el desdoblamiento de las subbandas para el valor de  $k_y = 0 \text{ nm}^{-1}$ .

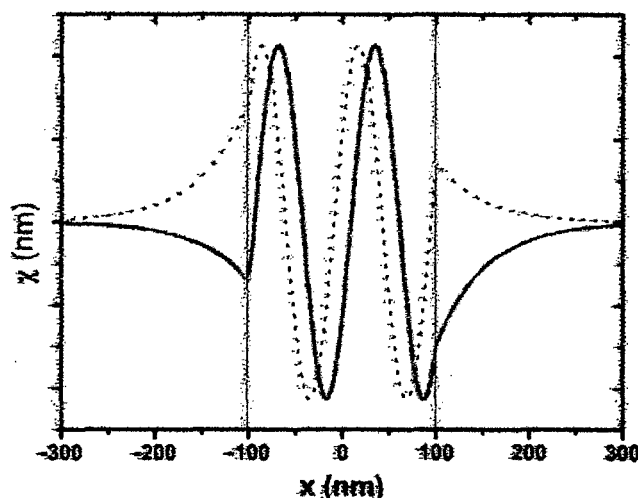


Figura 2.13: Funciones de onda  $\chi_A$  (líneas punteadas) y  $i\chi_B$  (líneas continuas) para el cuarto estado excitado y un valor de  $k_y = 0,03 \text{ nm}^{-1}$ . Note que estas funciones no reflejan simetría con respecto a la posición  $x = 0$ .

También, mostramos un caso donde el parámetro de masa es  $\beta = 10 \text{ meV}$  para todas las regiones de la estructura. La Figura (2.12) muestra el mismo comportamiento que la Figura (2.11). Como mencionamos anteriormente, este parámetro involucra la diferencia entre las energías de sitio de los átomos que constituyen la celda unitaria, y es responsable por el aumento del número de estados confinados en el límite  $k \rightarrow 0$ . Aquí, el espectro de estados confinados es limitado en la parte superior (líneas punteadas) e inferior (líneas discontinuas), respectivamente, por las relaciones,

$$|E - U_0| = [(\gamma k_y)^2 + \beta^2]^{1/2}, \quad (2.43)$$

$$|E| = [(\gamma k_y)^2 + \beta^2]^{1/2}. \quad (2.44)$$

En el capítulo 4, vamos a estudiar casos más generales en los que el parámetro  $\beta$  será diferente en las diversas regiones indicadas en la Figura (2.11).

Con el objetivo de hacer un estudio completo para este caso particular presentamos en la Figura (2.13) los pseudo-espinores  $\chi_A(x)$  (línea punteada) y  $i\chi_B(x)$  (línea continua) correspondientes a la cuarta subbanda y para un valor del vector de onda  $k_y = 0,03 \text{ nm}^{-1}$ .

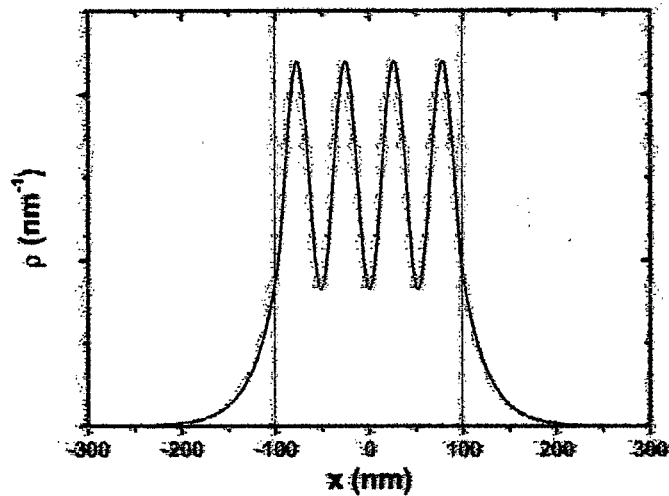


Figura 2.14. Densidad de probabilidad relativa a la cuarta subbanda. Note que esta función refleja totalmente la simetría del sistema.

Todos los otros parámetros son los mismos del caso de la Figura (2.12). Las líneas verticales corresponden a las interfaces del potencial. Observe que las componentes  $\chi_A(x)$  y  $i\chi_B(x)$  no son curvas suaves en las interfaces; consecuencia de la discontinuidad de sus derivadas. Note también que  $\chi_A(x)$  y  $i\chi_B(x)$  no muestran una simetría definida, lo que hace difícil, a primera vista, indicar a que subbanda pertenece. Sin embargo, esta simetría es claramente observada cuando graficamos la densidad de probabilidad  $\rho = \psi^* \psi = |\chi_A(x)|^2 + |\chi_B(x)|^2$  en la Figura (2.14). Note que la curva es completamente simétrica con relación al origen del sistema y permite identificar rápidamente a que subbanda pertenece (número de picos).

Finalmente, luego de comprobar estos resultados existentes en la literatura, procederemos a estudiar, de manera sistemática, el sistema mas general, un pozo cuántico duplo acoplado por una barrera.

# Capítulo 3

## Materiales y métodos

### 3.1. Materiales

Este trabajo teórico no fue sometido a la realización experimental. En ese sentido, esta contribución teórica se ha desarrollado sobre la base de artículos científicos, textos y experiencias propias en ecuaciones diferenciales, física del estado sólido y su aplicación en el estudio del Grafeno.

Además también se ha usado material de tipo técnico en el diseño e impresión del texto de la tesis. Toda la información ha sido procesada en una computadora personal, usando el programa de texto Latex2e, mediante el cual se han editado todo el formalismo Matemático y la redacción de la presente tesis. Asimismo, para obtener los resultados numéricos usamos el compilador de Intel Fortran, y para el proceso de la obtención de gráficos utilizamos software especializado, el graficador Origin 8.0.

### 3.2. Métodos

Luego de obtener la información necesaria para la investigación, se han usado fundamentalmente, los métodos inductivo, deductivo y analítico, las cuales serán detalladas

a continuación.

Debido a que este trabajo de tesis es de naturaleza teórica, primero fue necesario el correcto entendimiento del problema y las ecuaciones que rigen el fenómeno en estudio. Así, se procedió a postular una función de onda que satisfaga la ecuación diferencial que rige el problema en estudio. En seguida se establecieron las condiciones de frontera del problema. Este procedimiento nos llevó a resolver un sistema de ecuaciones, a través de las cuales se pudo llegar a una ecuación trascendental que depende tanto de la energía de los portadores de carga y de sus vectores de onda.

/Ya que nuestro objetivo es estudiar la estructura de banda del grafeno ósea, la energía en función del vector de onda, procedimos a la elaboración de un programa numérico que pudiera calcular las raíces de una ecuación trascendental. Vea Apéndice E.

Es importante resaltar que el programa numérico en su integridad fue realizado por el autor de esta tesis. Así, la versatilidad de dicho programa numérico nos permite conocer la estructura de banda, las funciones de onda, y la densidad de probabilidad del sistema en estudio. Todo esto es obtenido apenas introduciendo parámetros como la altura de la barrera de potencial y las anchuras de los pozos y barreras cuánticas.

Finalmente, es importante resaltar que las ecuaciones y resultados obtenidos reflejan las leyes o principios físicos de la Física del estado sólido y su aplicación en el estudio del grafeno, así como también las herramientas matemáticas avanzadas referidas por el análisis y los criterios sobre las soluciones de ecuaciones diferenciales; de igual modo los conocimientos o resultados contenidos en las referencias bibliográficas del presente trabajo.

## Capítulo 4

# Análisis de los resultados y discusión

En este capítulo mostraremos nuestros resultados numéricos. Para ello, realizaremos un estudio sistemático de los efectos que son inducidos cuando los diferentes parámetros del sistema varían. En ese sentido, estudiaremos primero el espectro de partículas independiente tanto para los estados confinados como para los estados libres. Este estudio permitirá reconocer las regiones del sistema así como también los parámetros involucrados. Luego analizaremos las consecuencias físicas que están involucradas en el sistema, considerado asimétrico y con parámetro de masa  $\beta = 0$ . Finalmente, nuestro estudio se limitará al caso en el cual los modos cuánticos son armónicos simétricos y donde el parámetro de masa  $\beta \neq 0$  para todas las regiones donde el potencial confinado existe. Nuestros resultados muestran que la variación de estos parámetros en la estructura estudiada tiene un efecto muy ligado a la contribución de la conductancia en las subbandas de más baja energía.

### 4.1. Modos de energía

A continuación discutiremos sobre los valores adecuados para los diferentes parámetros del sistema tales como, altura y ancho, de manera que se pueda representar una situación en la cual se tenga un confinamiento unidimensional. En ese sentido, basaremos nuestros análisis apenas para el menor número de subbandas (4 primeras). En este universo, los efectos de la anisotropía espacial inducidos por los diferentes parámetros de masa se

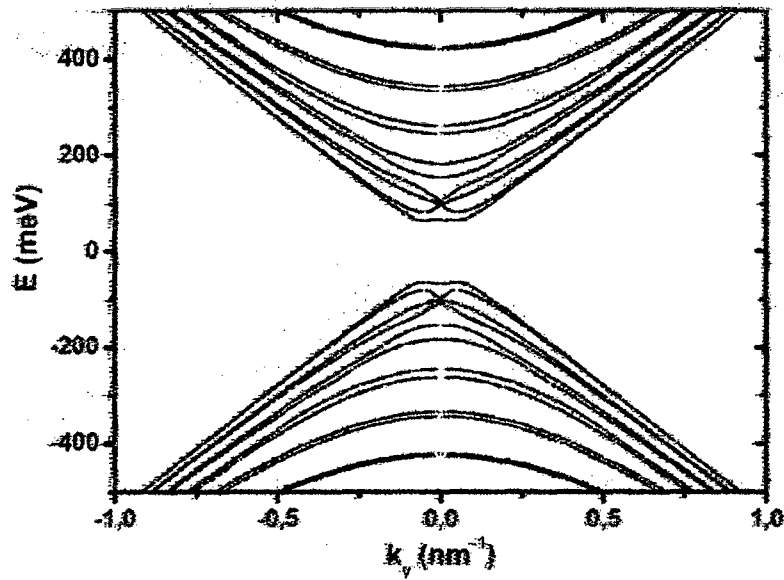


Figura 4.1: Estructura de banda del grafeno para el punto de Dirac  $K$ . En esta figura consideramos las soluciones para los estados confinados, así como también estados de partícula libre. Note que energías positivas (negativas) están asociadas a la banda de conducción (Valencia).

revelan evidentes. En la Figura (4.1) se muestra la relación de dispersión de los estados de partícula independiente para todo el espacio de fase  $E-k$ .

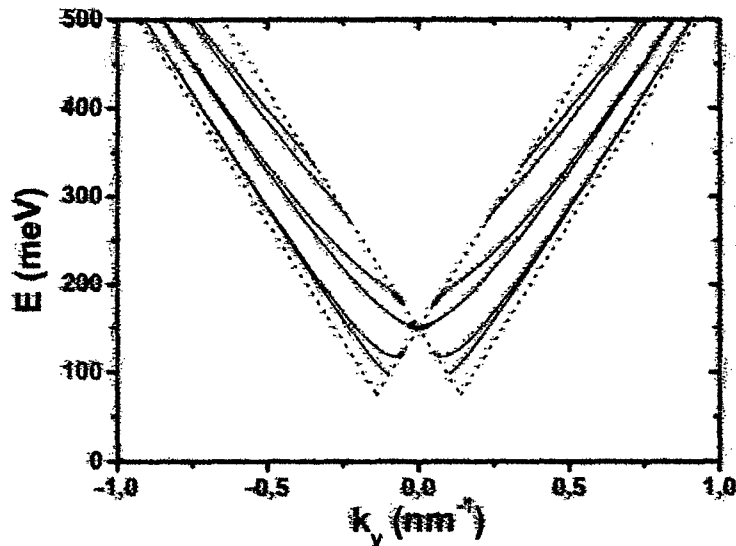


Figura 4.2: Espectro de energía de los estados confinados para una estructura simétrica con anchos  $L_1 = L_2 = 14 \text{ nm}$  ancho de barrera  $L_b = 4 \text{ nm}$ ,  $U_0 = 150 \text{ meV}$ . El parámetro  $\beta = 0 \text{ meV}$ , para todas las regiones del potencial confinador.

Por lo tanto, resolvemos numéricamente la ecuación (2.42) para un doble hilo cuántico



acoplado simétrico. Los parámetros usados fueron establecidos como siendo  $L_1 = L_2 = 20$  nm,  $L_b = 4$  nm,  $U_0 = 100$  meV y el parámetro de masa,  $\beta$ , nulo para todas las regiones.

Note la presencia de un *gap* de energía entre las bandas de valencia (energía negativa) y la de conducción (energía positiva). El *gap* entre estas bandas es generado por el potencial confinador en  $k_y = 0$ . A medida que  $U_0 \rightarrow 0$  el *gap* desaparece en el punto  $k_y = 0$ , lo cual refleja la relación de dispersión lineal del grafeno.

Esta estructura de banda mostrada en la Figura (4.1) es muy similar a la relación de dispersión en un nanohilo de grafeno mencionada en la introducción y conocida en la literatura como hilo *armchair*, [59]. Debemos recordar, que este hecho sugiere fuertemente que nuestro modelo puede ser aplicado a un sistema en el cual 2 hilos de grafeno estarían acoplados. Debido a la simetría de la Figura (4.1), nos preocuparemos de ahora en adelante, solamente en la región del espacio de fase donde tanto el vector de onda y la energía asumen valores positivos.

## 4.2. Parámetro de masa $\beta = 0$

### 4.2.1. Hilos cuánticos simétricos

Comenzamos discutiendo nuestros resultados para una estructura simétrica, donde el ancho del primer hilo es idéntico a la del segundo, es decir,  $L_1 = L_2 = 14$  nm. La barrera de acoplamiento existente entre los pozos es caracterizada por un potencial electrostático (externo) de confinamiento y tiene un ancho  $L_b = 4$  nm y altura  $U_0 = 150$  meV. La Figura (4.2) muestra la relación de dispersión  $E(k)$  para los cinco primeros estados confinados que caracterizan los modos de energía de la banda de conducción. En forma similar a la Figura (3.2), las fronteras donde existen estados confinados son indicadas por las líneas punteadas. En la figura también se muestra puntos rojos. Estos puntos están muy próximos de las fronteras de la región de confinamiento y representa estados que se extienden por toda la estructura (estados extendidos). La existencia de tales estados están íntimamente relacionados al vector de onda  $k_x$ , definido en la Ec. (2.36) de la región I. Un análisis detallado de la densidad de probabilidad de los estados asociados a los puntos

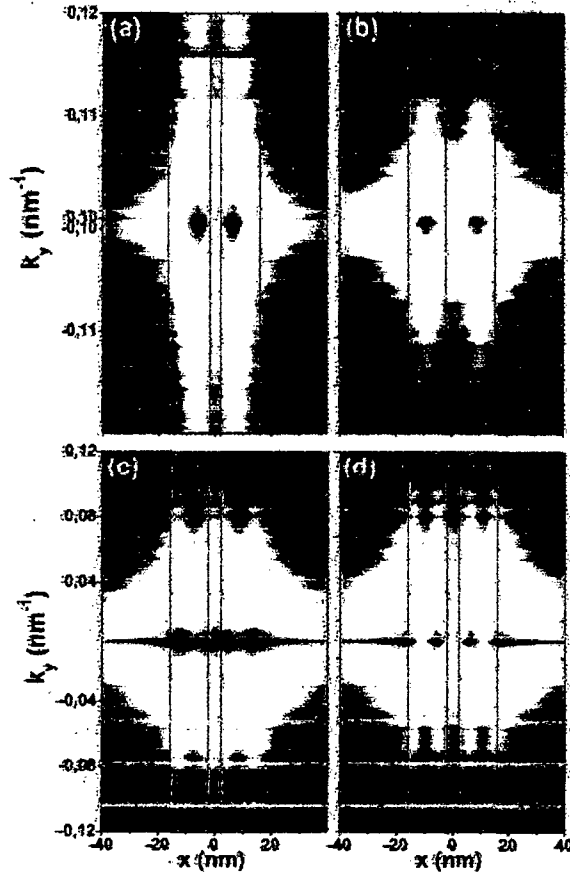


Figura 4.3: Densidad de probabilidad correspondiente a los mismos parámetros de la estructura en la Figura 4.2, para (a)  $n = 1$ , (b)  $n = 2$ , (c)  $n = 3$ , (d)  $n = 4$ , subbandas. Las líneas verticales indican las interfaces del potencial confinador. Note además, que la presencia de estados extendidos para  $n = 3$  y  $n = 4$  es evidente (puntos rojos)

rojos permite afirmar que estos estados obedecen a la relación  $0 < \kappa < 1$ . Es razonable suponer que estos estados extendidos estén asociados a una recombinación entre estados de electrones y de huecos que existen fuera de la región de confinamiento, proporcionando una densidad de probabilidad uniforme a lo largo de la estructura.

Así, con la intención de evidenciar y estudiar las características de estos estados extendidos, debemos graficar la densidad de probabilidad para la función de onda propuesta en la ecuación (2.30). De esta manera, describimos la densidad de probabilidad  $\rho_n^k(x)$  del sistema en función de los índices de subbanda  $n$  y del vector de onda  $k_y = k$ . Esta expresión asume la siguiente forma

$$\rho_n^k(x) = |\chi_A^{nk}(x)|^2 + |\chi_B^{nk}(x)|^2. \quad (4.1)$$

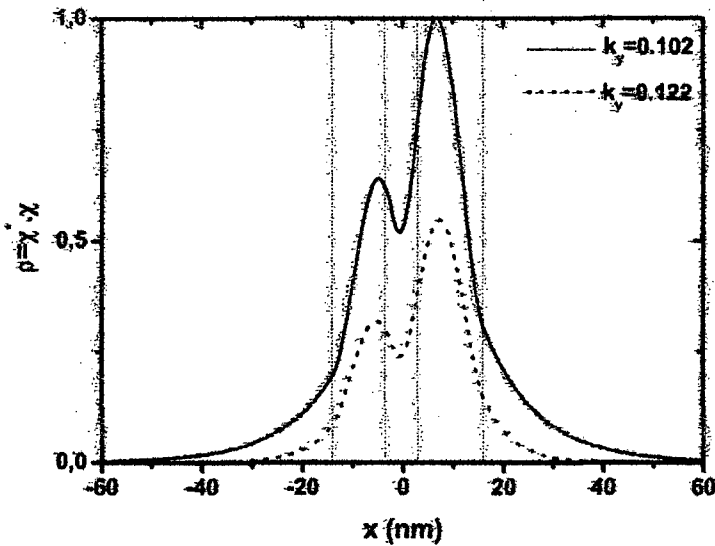


Figura 4.4: Densidad de probabilidad para una estructura en la que la anisotropía espacial es evidente. Los parámetros de esta estructura son  $L_1 = 12 \text{ nm}$ ,  $L_2 = 14 \text{ nm}$ ,  $L_3 = 4 \text{ nm}$  y  $U_0 = 150 \text{ meV}$ . Es evidente que existe una fuerte localización de la función densidad de probabilidad en el pozo de largura  $L_2$ . Note además, que la amplitud de la función alcanza su máximo valor cuando el vector de onda  $k_y \rightarrow 0$ .

En la Figura (4.3) mostramos la densidad de probabilidad  $\rho_n^k(x)$  para las cuatro primeras subbandas, es decir, para las subbandas  $n = 1$  (Figura 4.3a),  $n = 2$  (Figura 4.3b),  $n = 3$  (Figura 4.3c) y  $n = 4$  (Figura 4.3d). Las líneas verticales indican las interfaces del potencial confinador descrito en la Figura (3.1). El color rojo (azul) indica los valores para los cuales la intensidad de  $\rho_n^k(x)$  asume su máximo (mínimo). Note que, para una dada subbanda, cuando el valor del vector de onda  $k_y$  asume su mínimo (máximo) valor, la intensidad de la densidad de probabilidad asume su máximo (mínimo) valor. Además, para  $n = 1$ , observe que la densidad de portadores de carga esta distribuida de forma equivalente y uniforme en cada pozo. Más aún, observe que no hay presencia de estados extendidos en esta subbanda, pues la tonalidad de color verde no aparece en las regiones  $I$  y  $V$ . Por otro lado, para  $n = 3$  y  $n = 4$ , existe una fuerte manifestación de los estados extendidos indicados por el color verde y rojo a lo largo de todas las regiones de la estructura. Note por último, que, para  $n = 3$ , hay evidencia que los estados asociados a electrones y huecos se recombinan en la región de la barrera de potencial (vea la intensidad de color rojo en la región  $III$  de la Figura 4.3(c)).

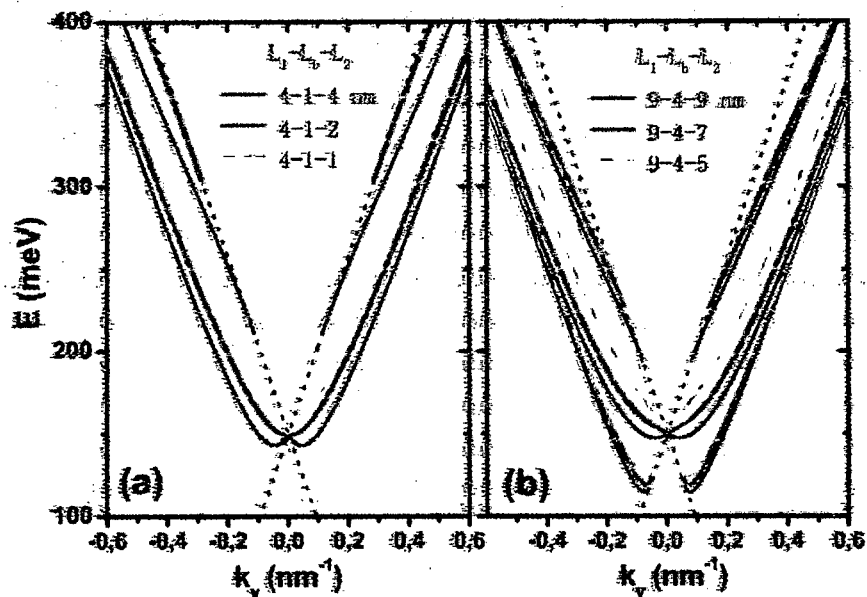


Figura 4.5: Variación de los mínimos asociados a la energía (velocidad de grupo) debido a la anisotropía espacial generada en la estructura: (a) Muestra la destrucción del mínimo en la energía para la primera subbanda (color negro), cuando la anisotropía espacial es más evidente (color verde). (b) Destrucción del mínimo de la segunda subbanda.

#### 4.2.2. Hilos cuánticos asimétricos

Discutiremos aquí el comportamiento de la densidad de probabilidad  $\rho_n^k(x)$  para una estructura que presenta anisotropía espacial. Trataremos ahora de dos hilos cuánticos acoplados pero de diferentes anchos. Los nuevos parámetros para la estructura serán,  $L_1 = 12 \text{ nm}$ ,  $L_2 = 14 \text{ nm}$ . El ancho y la altura de la barrera de potencial son las mismas de las consideradas en la Figura (4.3). Dentro de este contexto, presentamos la Figura (4.4), que grafica  $\rho_n^k(x)$  en función de la coordenada  $x$  para la primera subbanda  $n = 1$ . Aquí, el vector de onda  $k = 0,102 \text{ nm}^{-1}$  (línea continua) y  $k = 0,122 \text{ nm}^{-1}$  (línea punteada). Note que la anisotropía espacial en la estructura hace que la densidad de portadores de carga tenga, naturalmente, mayor intensidad en la región del hilo de mayor ancho. También verificamos, que para valores menores (mayores) del vector de onda, la densidad de probabilidad es máxima (mínima).

#### Efectos en la conductancia

La aplicación de nuestro modelo teórico en la física experimental está basada, entre otros efectos, aquellos relacionados a la densidad de portadores de carga en nuestra es-

estructura. Dentro de este contexto, estudiaremos un caso en que el confinamiento cuántico, así como el efecto de anisotropía espacial, sean más evidentes. En ese sentido, disminuimos los valores de nuestros parámetros, de tal forma que el sistema se considere en el régimen puramente cuántico. Además, consideramos que el ancho de uno de los hilos será disminuida de manera continua hasta valores de la orden de pocos nanómetros. De esta manera, las líneas negras de la Figura (4.5a) muestran la relación de dispersión de las dos primeras subbandas para una estructura simétrica donde tenemos 4-1-4 nm. De este modo, queremos evidenciar la existencia de dos mínimos en la relación de dispersión para  $n = 1$ . En este trabajo queremos argumentar que tales mínimos serán, de alguna forma, responsables por la existencia de *plateaus* en el gráfico de la conductancia (a lo largo de los hilos) en función de la energía de los portadores, pues en la dispersión estos mínimos tienen velocidad de grupo nula, es decir  $dE(k)/dk = 0$ . Estos mínimos tendrán un efecto importante en eventuales *plateaus* de la conductancia. En realidad, trabajos recientes reportan que a cada uno de estos mínimos está asociada una contribución de  $2e^2/h$  en la conductancia medida a lo largo de los hilos [60]. Por lo tanto, si a estas contribuciones adicionamos los estados degenerados de *espín* electrónico (un simple factor 2), como también los estados degenerados de la red recíproca  $K'$  (otro factor 2), podemos argumentar fácilmente que estos mínimos serán responsables de la aparición de un escalón (*plateau*) en la referida conductancia en el valor de  $8e^2/h$ . A medida que estos mínimos dejan de existir, el *plateau* en la posición  $8e^2/h$  es destruido.

Basados en esta información, haremos un estudio del efecto de la anisotropía espacial sobre los mínimos de las relaciones de dispersión y, por consecuencia, sobre una eventual medición de la conductancia electrónica a lo largo de los hilos. Las curvas rojas y verde en la Figura (4.5a) corresponden a las relaciones de dispersión para sistemas cuyos parámetros son 4-1-2 nm y 4-1-1 nm, respectivamente. A medida que la anisotropía espacial se torna más fuerte, los dos mínimos en la relación de dispersión para  $n = 1$  se reducen a un único mínimo en  $k_y = 0$ . De acuerdo con nuestros argumentos, podemos prever, por tanto, que un *plateau* en la conductancia en una posición menor que el valor  $8e^2/h$  representará, claramente, una evidencia de anisotropía espacial en la muestra considerada.

Con el objetivo de presentar argumentos completos, la Figura (4.5b) muestra los mis-

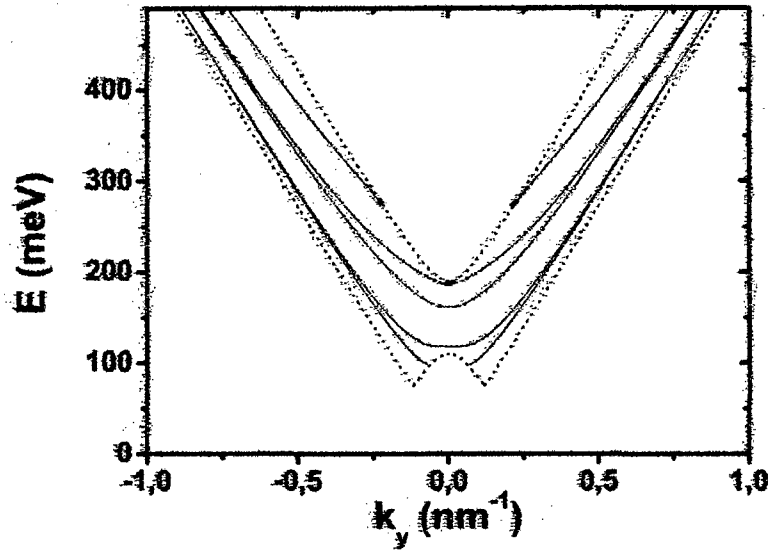


Figura 4.6: Modos de energía de los estados confinados para una estructura en la cual el parámetro  $\beta = 40 \text{ meV}$ . el ancho de los pozos, barrera y altura del potencial fueron los mismos del caso que generó la Figura 4.2. Note también que este parámetro de masa suprime la presencia de los estados extendidos en la estructura, y provoca un desdoblamiento de subbandas para el valor de  $k_y = 0$ .

mos efectos sólo que esta vez para la segunda subbanda  $n = 2$ . Para una estructura simétrica  $9\text{-}4\text{-}9 \text{ nm}$ , la presencia de dos mínimos en la relación de dispersión para  $n = 2$  ( $n = 1$ ) configura la predicción de la existencia de un *plateau* en la conductancia en el valor de  $16e^2/h$  ( $8e^2/h$ ). Note que a medida que la anisotropía espacial es más significativa (líneas rojas y verde), los mínimos en la relación de dispersión para  $n = 2$  son reducidos apenas a uno en  $k_y = 0$ . Este efecto tendrá la misma consecuencia en la conductancia discutida anteriormente. Por otro lado, esta anisotropía especial introducida en el sistema es capaz de destruir los mínimos en la relación de dispersión para  $n = 1$ , manteniendo así el *plateau* en la conductancia en el valor de  $8e^2/h$ .

De esta forma, concluimos que al considerar la anisotropía espacial en la estructura la conductancia a lo largo de los hilos se modificará, y esto podría permitir a la vez, el control del flujo de portadores de carga a lo largo de los hilos.

### 4.3. Parámetro de masa $\beta \neq 0$

Motivados por los claros efectos que la anisotropía espacial tendrá sobre una eventual medición de la conductancia a lo largo de la dirección de los hilos en nuestra estructura, buscaremos en esta sección entender, de manera sistemática, los efectos que el parámetro de masa  $\beta$ , en cada región indicada en la Figura (3.1), tendrá sobre tales relaciones de dispersión. De esta manera, discutiremos en esta sección los resultados numéricos apenas para el caso de hilos cuánticos acoplados y simétricos. Es decir, trataremos de simular los mismos efectos de anisotropía espacial, estudiados en la sección anterior, a través de elecciones apropiadas para los valores asociados a los parámetros de masa  $\beta$  en las diferentes regiones. Dentro de este contexto haremos un análisis de la estructura de banda (relación de dispersión) para estudiar en un primer momento el efecto de masa sobre los estados extendidos. En seguida, haremos un estudio de sus efectos en la conductancia.

La Figura (4.6) tiene el mismo comportamiento de la Figura (4.2), pero con un valor de  $\beta = 40 \text{ meV}$  para todas las regiones de la estructura. Como ya habíamos comentado cuando se estudio la Figura (3.3), valores finitos de  $\beta$  están asociados a la diferencia entre las energías de sitio de los átomos de la celda unitaria y son responsables por el aumento del número de estados confinados en el límite  $k \rightarrow 0$ . Note la existencia de estados electrónicos en la segunda, tercera y cuarta subbanda para  $k_y = 0$  que no eran permitidos para  $\beta=0$ . También, observe que los estados extendidos que existían en la segunda, tercera y cuarta subbanda fueron claramente suprimidos. Esto indica que el parámetro de masa,  $\beta$ , se revela como responsable por la reducción de aquellos estados mixtos, en que estados confinados se recombinan con estados libres del entorno de la región de confinamiento.

La densidad de probabilidad para las primeras cuatro subbandas correspondiente a la Figura (4.6), es mostrada en la Figura (4.7). Se trata de la misma Figura (4.3), pero con una fuerte ausencia de los estados extendidos en la tercera subbanda (Figura 4.7c). Por otro lado, es posible notar que en la Figura (4.7c) existe un fuerte tunelamiento en la región de la barrera (entendido a través del color rojo). Tomando estas figuras como referencia, es posible concluir que los estados extendidos son en realidad suprimidos a medida que el valor del parámetro de masa,  $\beta$ , se torna mayor. Además,  $\beta$  altera

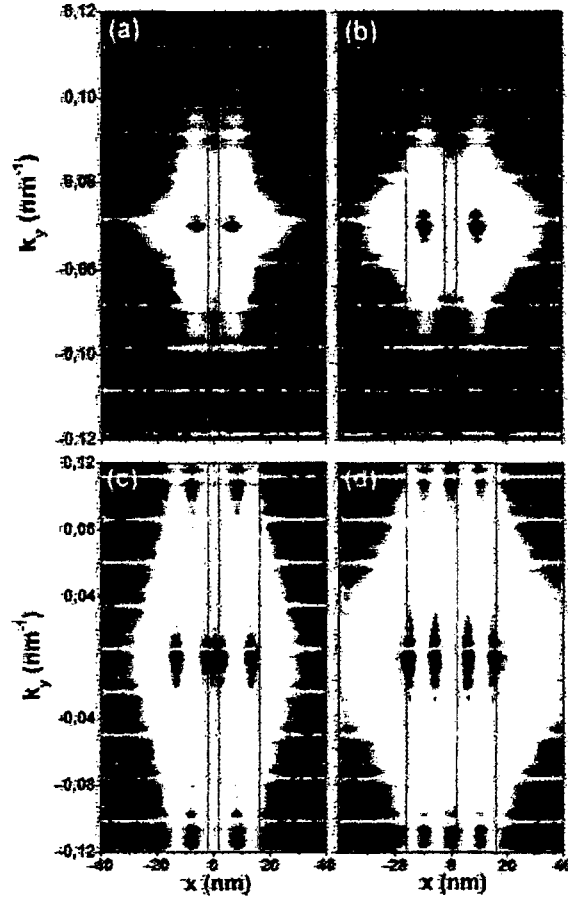


Figura 4.7: Intensidad de la densidad de probabilidad correspondiente a la estructura en la Figura 4.6. Note que la principal diferencia entre estas figuras se encuentra para  $n = 3$  y  $n = 4$  donde los colores a lo largo de la estructura son suprimidos. Es claro que la presencia del parámetro de masa acaba con los estados extendidos.

claramente la posición de los mínimos en la relación de dispersión para  $n = 2$ . Discutiremos este efecto detalladamente en seguida. Para esto, es conveniente definir el parámetro  $\Delta = \beta_I - \beta_{III}$ , que representará la diferencia entre los parámetros de masa entre las regiones *I* y *III*.

#### 4.3.1. Efectos en la conductancia relacionados a $\Delta$

Las Figuras (4.8a-b) muestran la relación de dispersión, para valores positivos del vector de onda  $k_x$ , de la primera (segunda) subbanda de una estructura simétrica  $9-4-9$  nm para  $\beta_{II} = \beta_{III} = \beta_{IV} = 0$ . Las diferentes curvas (colores), por lo tanto, muestran la variación del parámetro  $\beta_I$ , es decir, la posible interacción entre el Grafeno y el sustrato en las regiones *I* y *V*. El incremento de  $\Delta$  es claramente responsable por la destrucción



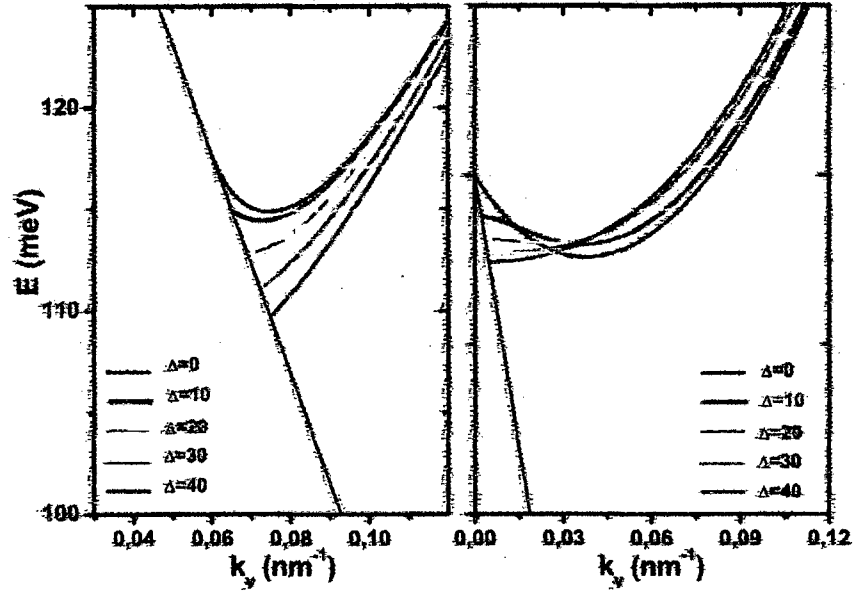


Figura 4.8. Variación de la velocidad de grupo debido al parámetro de anisotropía de masa  $\Delta = 0, 10, 20, 30, 40 \text{ meV}$ , (de arriba para abajo), respectivamente. (a) Muestra tal efecto para la primera subbanda. (b) Muestra el efecto en la segunda subbanda. Los parámetros de la estructura son asumidos siendo  $L_1 = L_2 = 9 \text{ nm}$ ,  $L_b = 4 \text{ nm}$  e  $U_0 = 150 \text{ meV}$ .

del mínimo en la relación de dispersión para  $n = 1$ , Figura (4.8a). Es posible verificar el mismo efecto en la relación de dispersión para la segunda subbanda,  $n = 2$ . La variación de  $\Delta$  en este caso altera la curvatura de una forma más exótica. Note que para  $\Delta = 10 \text{ meV}$  (curva roja) la relación de dispersión presenta un punto de inflexión en  $k_y = 0$ . Esta alteración tendrá una consecuencia clara en la posición de los *plateaus* de la conductancia del material. Nuestros resultados muestran claramente que es posible manipular la conductancia del material, a partir de la interacción apropiada entre los átomos de grafeno y aquellos pertenecientes al sustrato en que fueron depositados, a través del parámetro  $\Delta$ .

La Figura (4.9) tiene el mismo comportamiento de la Figura (4.8), salvo un parámetro de masa en la región III diferente de cero, es decir,  $\beta_{III} = 10 \text{ meV}$ . Todos los otros parámetros del sistema son los mismos del caso de la Figura (4.8). La semejanza en el comportamiento de estos dos gráficos es evidente. En ambos casos, el incremento de  $\Delta$  es responsable por la destrucción de los mínimos existentes en la relación de dispersión en las dos primeras subbandas. Además, note la presencia de la línea punteada que limita inferiormente la región donde las relaciones de dispersión de los estados confinados se localizan. Esta línea aparece cuando  $\Delta \geq 0$ . El surgimiento de este nuevo límite es conse-

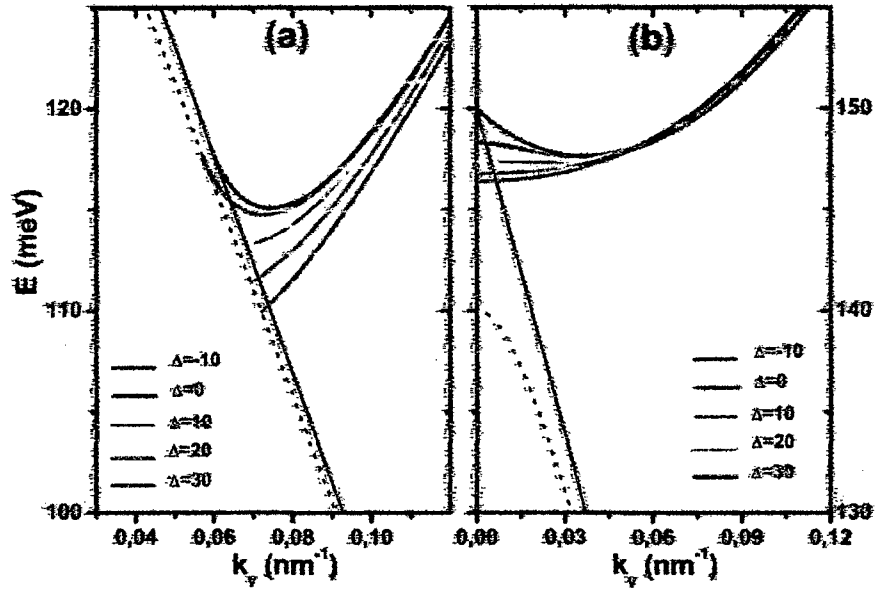


Figura 4.9: Variación de la velocidad de grupo debido a la anisotropía generada en el parámetro de masa  $\Delta = -10, 0, 10, 20, 30$  meV, (de arriba para abajo), respectivamente. (a) Muestra el efecto para la primera subbanda. (b) Efecto en la segunda subbanda. El ancho de los pozos, y barrera así como la altura del potencial son los mismos de la Figura (4.8). Las líneas oblicuas sólidas (punteadas) indican los límites de los estados confinados para  $\Delta < 0$  ( $\Delta \geq 0$ ).

cuencia directa de considerar el parámetro  $\beta_{III} \neq 0$ . En realidad, los resultados muestran que, para un caso más general, los parámetros de masa  $\beta$  en las ecuaciones (2.43) y (2.44) asumen valores diferentes que corresponden al  $\min(\beta_I, \beta_{III})$  y  $\max(\beta_{II}, \beta_{IV})$ , respectivamente. El valor de  $\beta = \min(\beta_I, \beta_{III})$  en la ecuación (2.43) indica que el límite inferior de la región de confinamiento en el espacio  $E-k$  es definido por la menor interacción existente entre los átomos del Grafeno y los átomos del sustrato. Por otro lado, en la línea de frontera asociada con la ecuación (2.44),  $\beta = \max(\beta_{II}, \beta_{IV})$ , indica un valor de mayor interacción existente entre los átomos del Grafeno y los átomos del sustrato. Estos efectos pueden ser verificados experimentalmente.

#### 4.3.2. Control de la densidad de portadores de carga

A parte de los efectos que el parámetro de masa,  $\beta$ , tiene sobre la conductancia del material, nuestros resultados muestran que  $\beta$  puede ser responsable también por el control de la densidad de portadores de carga en la muestra. Para que este efecto pueda ser

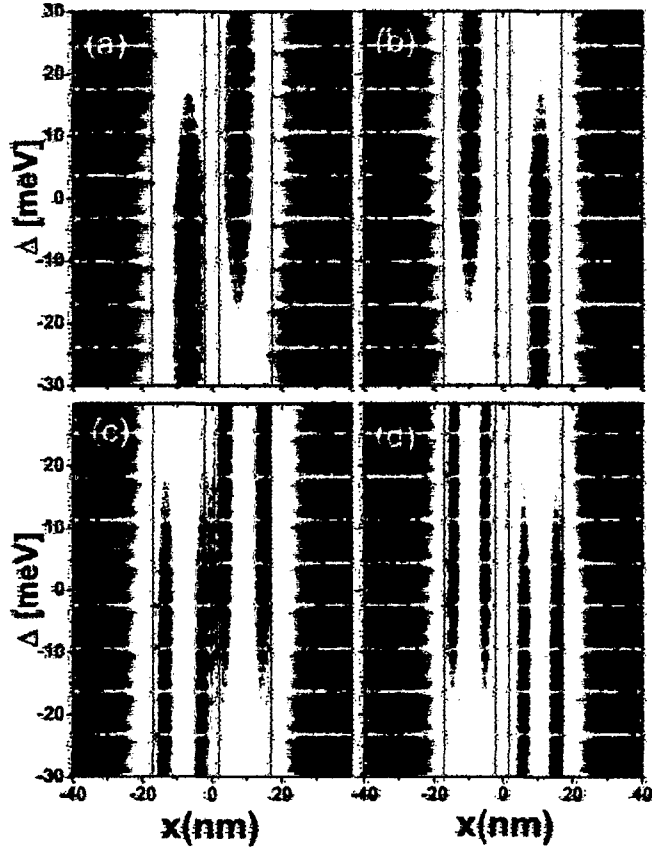


Figura 4.10: Intensidad de la función de densidad de probabilidad para las cuatro primeras subbandas. (a)  $n = 1$ , (b)  $n = 2$ , (c)  $n = 3$ , y (d)  $n = 4$ . La estructura es constituida por los parámetros  $L_1 = L_2 = 15 \text{ nm}$ ,  $L_b = 4 \text{ nm}$  y  $U_0 = 150 \text{ meV}$ . Las líneas verticales indican las interfaces del potencial confinador.

observado en la estructura definiremos,

$$P_n(x) = \sum_k \rho_n^k(x), \quad (4.2)$$

como siendo la densidad de probabilidad relacionada a una dada subbanda  $n$ . Note que estamos aquí tratando de una serie convergente, una vez que, como ya discutimos anteriormente,  $\lim_{k \rightarrow \infty} [\rho_n^k(x)] = 0$ , es decir, los estados electrónicos que posean valores grandes del vector de onda  $k$  tiene su densidad de probabilidad significativamente menor si es comparada con aquellas para valores pequeños del vector de onda  $k$ .

EL color rojo de la Figura (4.10) muestra el máximo de la intensidad de la función  $P_n(x)$  como una función de la coordenada  $x$  y los parámetros  $\Delta$  para las cuatro primeras subbandas. Las líneas verticales indican las interfaces del perfil del potencial. Aquí, esta-

nos tomando dos hilos acoplados y simétricos de ancho  $L_1 = L_2 = 15 \text{ nm}$ , separados por una barrera de ancho  $L_b = 4 \text{ nm}$  y de altura  $U_0 = 150 \text{ meV}$ . Note que cuando  $\Delta = 0$ , la densidad de portadores  $P_m(n)$  ( $m = 1, 2, 3, 4$ ) en ambos casos, los pozos poseen la misma intensidad. Además para estados con índices de subbanda impares, a medida que el valor del parámetro  $\Delta$  es incrementado, la densidad de portadores es transferida del pozo de ancho  $L_1$  para el pozo de ancho  $L_2$ . Para el caso de estados con índices de subbanda pares el efecto es inverso. Luego es claro que el incremento del parámetro  $\Delta$  tiene el mismo efecto asociado a la quiebra de simetría espacial (Figura 4.4), sirviendo también como una signatura de las diferentes interacciones entre las regiones *I* y *III*.

# Capítulo 5

## Conclusiones y perspectivas

En este trabajo se hizo un estudio sistemático de las propiedades de partícula independiente en dos hilos cuánticos acoplados y basados en grafeno. A partir de nuestros resultados es posible proponer dispositivos capaces de regular el control de la densidad de portadores de carga en las diferentes regiones consideradas. Dentro de este contexto, esperamos que tales dispositivos sirvan como base en la fabricación de futuras aplicaciones electrónicas.

1) Estudiamos los efectos que la anisotropía espacial de la estructura tiene sobre las cuasi-partículas. En ese sentido, mostramos que la referida anisotropía es capaz de concentrar mayor cantidad de cuasi-partículas en un determinado pozo.

2) Mostramos también que esa anisotropía es responsable por destruir los mínimos de la relación de dispersión de las energías pertenecientes a las más bajas subbandas. Esto se refleja con la contribución de estos mínimos en la conductancia electrónica a lo largo de los hilos. Efectos análogos fueron mostrados para el caso en que la anisotropía espacial es simulada con valores apropiados para el parámetro  $\beta$  en cada región donde el potencial confinador se define en la muestra.

Ciertamente, el estudio del espectro de partícula independiente realizado en este trabajo es el punto de partida para el estudio de un sistema más real en que se considere la interacción entre los electrones. En ese sentido, entre las perspectivas se encuentran el estudio del espectro colectivo (*plasmones*) de las cuasi-partículas en estas estructuras de topología reducida.

# Apéndice A

## Puntos no equivalentes

### A.1. Puntos K y K'

Consideremos la relación entre la energía y el vector de onda, para el grafeno, en el cual la interacción a segundos vecinos es nula, es decir

$$E_{\lambda}(\mathbf{k}) = \lambda t_0 |f(\mathbf{k})|. \quad (\text{A.1})$$

De esta manera, procuramos los puntos de la primera zona de Brillouin donde las bandas de conducción y valencia se interceptan. Esto sucede para la condición

$$f(\mathbf{k}) = (1 + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_3} = 0. \quad (\text{A.2})$$

Lo que implica necesariamente que se cumpla

$$\Re f(\mathbf{k}) = (1 + \cos \mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2 + \cos \mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3) \cos \mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_3 - (\sin \mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2 + \sin \mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3) \sin \mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_3 = 0, \quad (\text{A.3})$$

donde

$$\mathbf{a}_2 = a\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3}{2}\right), \quad \mathbf{a}_3 = a\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3}{2}\right) \quad \text{y} \quad \mathbf{R}_3 = (0, -a). \quad (\text{A.4})$$

Con esto se tiene

$$(1 + \cos[\frac{\sqrt{3}a}{2}(k_x + \sqrt{3}k_y)]) + \cos[\frac{\sqrt{3}a}{2}(-k_x + \sqrt{3}k_y)]) \cos k_y a +$$

$$(\text{sen}[\frac{\sqrt{3}a}{2}(k_x + \sqrt{3}k_y)] + \text{sen}[\frac{\sqrt{3}a}{2}(-k_x + \sqrt{3}k_y)]) \text{sen} k_y a = 0. \quad (\text{A.5})$$

De igual manera, se debe cumplir que

$$\text{Im}f(k) = (1 + \cos k a_2 + \cos k a_3) \text{sen} k R_3 - (\text{sen} k a_2 + \text{sen} k a_3) \cos k R_3 = 0, \quad (\text{A.6})$$

de donde

$$(1 + \cos[\frac{\sqrt{3}a}{2}(k_x + \sqrt{3}k_y)] + \cos[\frac{\sqrt{3}a}{2}(-k_x + \sqrt{3}k_y)]) \text{sen} k_y a +$$

$$(\text{sen}[\frac{\sqrt{3}a}{2}(k_x + \sqrt{3}k_y)] + \text{sen}[\frac{\sqrt{3}a}{2}(-k_x + \sqrt{3}k_y)]) \cos k_y a = 0. \quad (\text{A.7})$$

De la ecuación (A.5) se observa que para que la igualdad sea satisfecha, se debe cumplir que  $k_y = 0$  así como también,

$$[1 + 2 \cos(\frac{\sqrt{3}a}{2} k_x)] = 0. \quad (\text{A.8})$$

Esta última expresión es satisfecha para  $k_x = \pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}$ . Note que los mismos valores para  $k_x$  y  $k_y$  satisfacen la ec. (A.7). Por lo tanto, concluimos que la primera zona de Brillouin tiene dos puntos no equivalentes, los cuales son:

$$\mathbf{K} = (\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0), \quad \mathbf{K}' = (-\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0).$$

Estos son los llamados puntos de Dirac, y son definidos como los puntos donde las bandas  $\pi$  y  $\pi^*$  se interceptan.

# Apéndice B

## Ecuación de Dirac 2D

### B.1. Aproximación para bajas energías

De la ecuación (2.2) se observa que una aproximación para bajas energías es realizada haciendo la expansión del factor de acoplamiento  $f(k) = (1 + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_3}$ , en los alrededores de los puntos de Dirac  $K$  y  $K'$ , es decir

$$f(k)_{\mathbf{k}=\pm\mathbf{K}+\mathbf{q}} = (1 + e^{\pm i\mathbf{K}\cdot\mathbf{a}_2 + \mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_2} + e^{\pm i\mathbf{K}\cdot\mathbf{a}_3 + \mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_3})e^{\pm i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_3 + \mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_3} \quad (\text{B.1})$$

donde

$$\mathbf{a}_2 = a\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3}{2}\right), \quad \mathbf{a}_3 = a\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3}{2}\right), \quad \mathbf{R}_3 = (0, -a), \quad \mathbf{K} = \left(\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0\right), \quad \mathbf{K}' = \left(-\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0\right). \quad (\text{B.2})$$

Reemplazando estos parámetros en la ecuación (B.1)

$$f(k)_{\mathbf{k}=\pm\mathbf{K}+\mathbf{q}} = (1 + e^{\pm i\frac{2\pi}{3}} \cdot e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_2} + e^{\mp i\frac{2\pi}{3}} \cdot e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_3}) \cdot e^{\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_3} \quad (\text{B.3})$$

y usando la expansión en serie de potencia de la función  $e^{ix} = 1 + ix - \frac{x^2}{2!} + \dots$ , se tiene

$$f(k)_{\mathbf{k}=\pm\mathbf{K}+\mathbf{q}} \approx \left\{ 1 + e^{\pm i\frac{2\pi}{3}} \left[ 1 + i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_2 - \frac{(\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_2)^2}{2} \right] + e^{\mp i\frac{2\pi}{3}} \left[ 1 + i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_3 - \frac{(\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_3)^2}{2} \right] \right\} \cdot e^{\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_3}, \quad (\text{B.4})$$

y considerando solamente los términos de primera orden en  $\mathbf{q}$  y también como  $e^{\pm \frac{2\pi i}{3}} =$



$1/2(-1 \mp i\sqrt{3})$  y  $e^{\mp i\frac{2\pi}{3}} = 1/2(-1 \pm i\sqrt{3})$ , tenemos

$$\begin{aligned}
 f(\mathbf{k})_{\mathbf{k}=\mathbf{K}+\mathbf{q}} &= (i\mathbf{q}\mathbf{a}_2 e^{\pm i\frac{2\pi}{3}} + i\mathbf{q}\mathbf{a}_1 e^{\mp i\frac{2\pi}{3}}) \cdot \mathbf{a} \cdot \mathbf{R}_s \quad (\text{B.5}) \\
 &= i \left[ \frac{\sqrt{3}a}{4} (q_x + \sqrt{3}q_y) \right] (-1 \mp i\sqrt{3}) + \left[ \frac{\sqrt{3}a}{4} (-q_x + \sqrt{3}q_y) \right] (-1 \pm i\sqrt{3}) \\
 &= \pm \frac{3a}{2} (q_x \pm iq_y),
 \end{aligned}$$

donde el signo  $\pm$  indica el punto  $K$  ( $K'$ ). De esta forma, el hamiltoniano que describe estos puntos no equivalentes es

$$H_{K,K'} = \frac{3at}{2} \begin{bmatrix} 0 & k_x - ik_y & 0 & 0 \\ k_x + ik_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -k_x + ik_y \\ 0 & 0 & -k_x - ik_y & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.6})$$

que en una notaci3n m3s simplificada lleva al hamiltoniano diagonal

$$H_{K,K'} = \begin{bmatrix} \sigma \cdot \mathbf{p} & 0 \\ 0 & -\sigma \cdot \mathbf{p} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.7})$$

La forma diagonal de este 3ltimo hamiltoniano se justifica cuando es considerado apenas las energ3as alrededor de los puntos de Dirac  $K$ .

# Apéndice C

## Funciones de onda

### C.1. Componente del pseudo-espinor

La componente  $\chi_B$  del pseudo-espinor, es obtenido reemplazando las soluciones de la ecuación (2.34) en la ecuación diferencial

$$-i\gamma \frac{d\chi_A}{dx} + i\gamma k_y \chi_A = (E - U(x) + \beta)\chi_B. \quad (\text{C.1})$$

Con esto se obtiene

$$\chi_B(x) = \begin{cases} if_- A_1 e^{\kappa x} & \text{región I,} \\ \frac{i}{(E+\beta_{II})} [B_2 (k_y \text{sen} q_{II} x - q_{II} \text{cos} q_{II} x) + C_2 (k_y \text{cos} q_{II} x + q_{II} \text{sen} q_{II} x)] & \text{región II,} \\ i(g_- D_3 e^{\kappa_b x} + g_+ E_3 e^{-\kappa_b x}) & \text{región III (C.2)} \\ \frac{i}{(E+\beta_{IV})} [F_4 (k_y \text{sen} q_{IV} x - q_{IV} \text{cos} q_{IV} x) + G_4 (k_y \text{cos} q_{IV} x + q_{IV} \text{sen} q_{IV} x)] & \text{región IV,} \\ if_+ H_5 e^{-\kappa x} & \text{región V,} \end{cases}$$

donde

$$f_{\pm} = \frac{\gamma(k_y \pm \kappa)}{(E-U+\beta)}, \quad g_{\pm} = \frac{\gamma(k_y \pm \kappa_b)}{(E-U+\beta_{III})}. \quad (\text{C.3})$$

# Apéndice D

## Matriz M

### D.1. Elementos de Matriz

$$M = \begin{bmatrix} \frac{I_-(E+\beta_{II})}{\gamma e^{-\kappa\delta}} & m_{12} & m_{13} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m_{22} & m_{23} & m_{24} & m_{25} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m_{34} & m_{35} & m_{36} & m_{37} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & m_{46} & m_{47} & \frac{I_+(E+\beta_{IV})}{\gamma e^{-\kappa\delta}} \\ e^{-\kappa\delta} & \sin q_{II}\theta & -\cos q_{II}\theta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sin q_{II}\sigma & -\cos q_{II}\sigma & e^{-\kappa\delta\sigma} & e^{\kappa\delta\sigma} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{\kappa\delta\sigma} & e^{-\kappa\delta\sigma} & -\sin q_{IV}\sigma & -\cos q_{IV}\sigma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\sin q_{IV}\delta & -\cos q_{IV}\delta & e^{-\kappa\delta} \end{bmatrix}$$

donde

$$\begin{aligned} m_{12} &= (k_y \sin q_{II}\theta + q_{II} \cos q_{II}\theta), & m_{13} &= q_{II} \sin q_{II}\theta - k_y \cos q_{II}\theta \\ m_{22} &= (k_y \sin q_{II}\sigma + q_{II} \cos q_{II}\sigma), & m_{23} &= q_{II} \sin q_{II}\sigma - k_y \cos q_{II}\sigma \\ m_{24} &= \gamma^{-1} g_- (E + \beta_{II}) e^{-\kappa\delta\sigma}, & m_{25} &= \gamma^{-1} g_+ (E + \beta_{II}) e^{\kappa\delta\sigma} \\ m_{34} &= \gamma^{-1} g_- (E + \beta_{IV}) e^{-\kappa\delta\sigma}, & m_{35} &= \gamma^{-1} g_+ (E + \beta_{IV}) e^{\kappa\delta\sigma} \\ m_{36} &= (q_{IV} \cos q_{IV}\sigma - k_y \sin q_{IV}\sigma), & m_{37} &= -(k_y \cos q_{IV}\sigma + q_{IV} \sin q_{IV}\sigma) \\ m_{46} &= (q_{IV} \cos q_{IV}\delta - k_y \sin q_{IV}\delta), & m_{47} &= -(k_y \cos q_{IV}\delta + q_{IV} \sin q_{IV}\delta) \end{aligned}$$

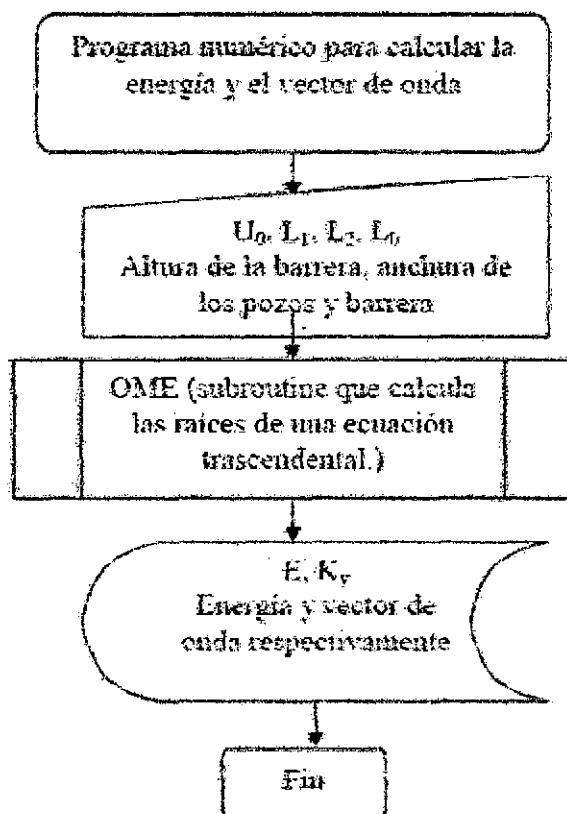
$$f_{\pm} = \frac{\gamma(k_{\pm} \pm r_2)}{(E-U+\beta_I)}, \quad g_{\pm} = \frac{\gamma(k_{\pm} \pm r_3)}{(E-U+\beta_{III})}$$

y

$$\theta = \frac{2L_1 + L_2}{2}, \quad \varphi = \frac{L_2}{2}, \quad \delta = \frac{2L_2 + L_3}{2}$$

# Apéndice E

## Programa numérico



A continuación se muestra el programa numérico usado en esta tesis, es importante resaltar que el programa solo necesita como variables de entrada la altura de la barrera y las anchuras de los pozos cuánticos.

```

*****
!* "Programa que permite calcular las raíces reales de una función Real"
*****
!Declaración de las variables que serán utilizadas
*****

IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)

PARAMETER (NZERO=15)

DIMENSION DETOTAL(4000),WVEC(4000),PL(NZERO),DAUXX(NZERO)

EXTERNAL FUNC,H5

COMMON/PRIM/WK

COMMON/PRIME/WE,WL1,WL2,WLB,WL,U0,WM,WM1,WM2,WMB

OPEN(10,FILE="DATOS0.DAT")

OPEN(20,FILE="DATOS1.DAT") !Arquivo que da a saída das Raíces

OPEN(30,FILE="DATOS2.DAT") !Arquivo que da a saída da função E=h.vf.ky

OPEN(40,FILE="DATOS3.DAT") !Arquivo que da a saída da função E=h.vf.ky+50

OPEN(1001,FILE="DATOSsw1.DAT") !Arquivo que da a saída da função E=-h.vf.ky+50

OPEN(2001,FILE="DATOSsw2.DAT")

OPEN (501, FILE='501.txt')

OPEN (502, FILE='502.txt')

OPEN (503, FILE='503.txt')

OPEN (504, FILE='504.txt')

OPEN (505, FILE='505.txt')

OPEN (506, FILE='506.txt')

OPEN (507, FILE='507.txt')

OPEN (508, FILE='508.txt')

```

```
OPEN (509, FILE='509.txt')
```

```
OPEN (510, FILE='510.txt')
```

```
!*****
```

```
! IMPUTS
```

```
!*****
```

```
WLB=3.0D0 !(nm)
```

```
WL1=15.0D0
```

```
WL2=15.0D0
```

```
U0=150.0d0 !( meV)
```

```
WL = WLB+WL1+WL2
```

```
WM=40.d0 !meV notar q WM=M*(VF)**2
```

```
WMB=0.D0
```

```
WM1=40.D0
```

```
WM2=40.D0
```

```
!*****
```

```
WKI =0.0D0 !Vector de Onda Inicial
```

```
WKF=1.0D0 !Vector de Onda Final
```

```
NPK=1000
```

```
PASSOKY=(WKF-WKI)/DFLOAT(NPK)
```

```
EI =0.0d0 !Energia Inicial
```

```
EF = 600.0d0 !Energia Final
```

```
NPE = 1000 DELTAE= (EF-EI)/DFLOAT(NPE)
```

```
X1=EI
```

```
X2=EF
```

```
XACC=1.0d-16 !Tolerancia
```

```
N=600 !Numero de iterações de Vetor de Onda (raices)
```

```

*****
!Calculo das funcioes E=h.vf.ky+U0
!*****

WKY=0.0d0

2 WKY=WKY+PASSOKY

GEP2 = sqrt(((0.539d0*WKY*1.0d3)**2+WMB**2)+U0
GEN = -sqrt(((0.539d0*WKY*1.0d3)**2+WMB**2)+U0
GEP15 =sqrt(((0.539d0*WKY*1.0d3)**2+WMB**2)

WRITE(10,*)WKY,GEP15
WRITE(20,*)WKY,GEP1
WRITE(30,*)WKY,GEP2
WRITE(40,*)WKY,GEN
if (WKY.lt.WKF) goto 2

!*****
!Programa General QUE FIXA IA ENERGIA y CALCULA IOS ZEROS De IA FUN-
CION TRANSCENDENTAL
!*****

WE = EI
DO IE = 1,NPE

DO LLL = 1, NZERO
PL(LLL) = .0d0
DAUXX(LLL) = 0.0d0
END DO

```



```

WK = WKI

DO IK = 1,NPK

  DETOTAL(IK) = FUNC(WK)
  WVEC(IK) = WK

  WK = WK + PASSOKY

END DO

!*****

CALL OME(DETOTAL,WVEC,PL,DAUX,NPK,PASSOKY)

!*****

DO LLL = 1, NZERO

  IF( PL(LLL) .NE. 0.0d0 ) THEN
! WRITE(500+LLL,*) PL(LLL), WE ,H5(PL(LLL))

  END IF

! GEP1 = 0.539d0*PL(LLL)*1.0d3

  GEP1 = 0.539d0*PL(LLL)*1.0d3
  GEP2 = sqrt(((0.539d0*PL(LLL)*1.0d3)**2+WMB**2)+U0
  GEN = -sqrt(((0.539d0*PL(LLL)*1.0d3)**2+WMB**2)+U0

```

```

IF( WE.LT.GEP2.AND.WE.GT.GEPL.AND.WE.GT.GEN) THEN
! WRITE(600+LLL,*) PL(LLL), WE
write(2001,*) PL(LLL),WE,H5( PL(LLL) )
!C write(2000+LLL,*) WE, H5( PL(LLL) ), PL(LLL)
END IF

```

```

END DO

```

```

WE = WE + DELTAE

```

```

END DO

```

```

STOP

```

```

END

```

```

!*****

```

```

!Determinacion de la Funcion

```

```

!*****

```

```

REAL*8 FUNCTION FUNC(WK)

```

```

IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)

```

```

COMMON/PRIME/E,WL1,WL2,WLB,WL,U0,WM,WMI,WM2,WMB

```

```

hvf=0.53940 ! (Este valor tiene unidades de eV nm)

```

```

IF (E.LT.0.0d0) THEN

```

```

U=U0*WL/(1.0d3*hvf)

```

```

ELSE

```

U=U0\*WL/(1.0d3\*hvf) ! Este parametro es adimensional

END IF

EE=E\*WL/(1.0d3\*hvf) ! Este Parametro es adimensional

B=WK\*WL

DMM=WM\*WL/(1.0d3\*HVF)

DMB=WMB\*WL/(1.0d3\*HVF)

DM1=WM1\*WL/(1.0d3\*HVF)

DM2=WM2\*WL/(1.0d3\*HVF)

TOL = 0.0D0

IF ((B\*\*2-(EE-U)\*\*2+DMM\*\*2)  
+TOL.LT.0.0d0.OR.(-B\*\*2+EE\*\*2-DM1\*\*2)  
+TOL.LT.0.d0.OR.(EE\*\*2-B\*\*2-DM2\*\*2)  
+TOL.LT.0.d0.OR.(B\*\*2-(EE-U)\*\*2+DMB\*\*2)  
+TOL.LT.0.0d0) GOTO 3

A=DSQRT( DABS(B\*\*2-(EE-U)\*\*2+DMM\*\*2) )

A1=DSQRT( DABS(B\*\*2-(EE-U)\*\*2+DMB\*\*2) )

Q1=DSQRT( DABS(EE\*\*2-B\*\*2-DM1\*\*2) )

Q2=DSQRT( DABS(EE\*\*2-B\*\*2-DM2\*\*2) )

FN=(B-A)/(EE-U+DMM)

FP=(B+A)/(EE-U+DMM)

GN=(B-A1)/(EE-U+DMB)

GP=(B+A1)/(EE-U+DMB)

```

    THETA=(2.0d0*WL1+WLB)/(2.0d0*WL)
DELTA=(2.0d0*WL2+WLB)/(2.0d0*WL)
SIGMA=WLB/(2.0d0*WL)

    A0=Q2*(SIGMA-DELTA)
    B0=Q1*(SIGMA-THETA)
    WK1=Q2*DCOS(A0)+B*DSIN(A0)
    -FP*(EE+DM2)*DSIN(A0)
    WK2=DSIN(A0)*GP*FP*(EE+DM2)**2
    +(Q2**2+B**2)*DSIN(A0)
    -(FP+GP)*(EE+DM2)*B*DSIN(A0)+
    (FP-GP)*(EE+DM2)*Q2*DCOS(A0)
    WK3=(Q2**2+B**2)*DSIN(A0)+
    FP*(EE+DM2)*Q2*DCOS(A0)-FP*(EE+DM2)*B*DSIN(A0)
    WK4=-GP*(EE+DM1)*WK1
    WK5=-GP*(EE+DM1)*WK3
    WK6=WK3-WK2*EXP(-4.0d0*A1
    SIGMA)-GN*(EE+DM2)*WK1
    WK7=WK5+GN*(EE+DM2)*WK4-GN*
    (EE+DM1)*WK2*DEXP(-4.0d0*A1*SIGMA)
    WK8=B*DSIN(B0)+Q1*DCOS(B0)
    WK9=Q1*DCOS(B0)-B*DSIN(B0)
    WK10=(B**2+Q1**2)*DSIN(B0)

    FUNC=FN*(EE+DM1)*(WK6*WK8-WK7
    DSIN(B0))-(WK10*WK6+WK9*WK7)

    3 RETURN
END

```

```

*****
ISUBROUTINE OME
*****

      SUBROUTINE OME(ED,Q,AUX,DAUX,NQ,DELTAW)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      PARAMETER (NZERO=15)
      DIMENSION Q(4000),ED(4000),AUX(15),DAUX(15)

      DO L = 1,NZERO
      AUX(L) = .0d0
      END DO

      J = 1
      DO I = 1,NQ

      IF (ED(I).LT.0.0d0.AND.ED(I-1).GT.0.0d0
      .OR.ED(I).GT.0.0d0.AND.ED(I-1).LT.0.0d0)
      THEN

      AUX(J) = Q(I-1) - DELTAW*ED(I-1) / ( ED(I)-ED(I-1) )

      DDM1=(ED(I-2)-2.0D0*ED(I-1)+ED(I))/DELTAW**2
      DDM2=(ED(I-1)-2.0D0*ED(I)+ED(I+1))/DELTAW**2

      DM=(ED(I)-ED(I-1))/DELTAW+DELTAW/6.0D0*(DDM1+2.0D0*DDM2)
      +DDM2*(AUX(J)-Q(I))+(DDM2-DDM1)*(AUX(J)-Q(I))**2/(2.D0*DELTAW)

      DAUX(J) = 3.14159265358979d0/DABS(DM)

```

```

      J = J+1
END IF

      END DO

RETURN

END

*****
DETERMINACION Del COEFICIENTE DE TRANSMISION H5
*****

      REAL*8 FUNCTION H5(WK)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)

      COMMON/PRIME/E,WL1,WL2,WLB,WL,U0,WM,WMI,WM2,WMB

      hvf=0.539d0 ! (Este valor tem unidades de eV.nm)

      IF (ELT.0.0d0) THEN
      U=U0*WL/(1.0d3*hvf)
      ELSE
      U=U0*WL/(1.0d3*hvf) ! Este parametro es adimensional
      END IF

      EE=E*WL/(1.0d3*hvf) ! Este Parametro es adimensional

      B=WK*WL

      DMM=WM*WL/(1.0d3*HVF)
      DMB=WMB*WL/(1.0d3*HVF)
      DMI=WMI*WL/(1.0d3*HVF)
      DM2=WM2*WL/(1.0d3*HVF)

```

```

TOL=0.0D0
IF ((B**2-(EE-U)**2+DMM**2)+
TOL.LT.0.0d0.OR.(-B**2+EE**2-DM1**2)
+TOL.LT.0.d0.OR.(EE**2-B**2-DM2**2))+
TOL.LT.0.d0.OR.(B**2-(EE-U)**2+DMB**2)
+TOL.LT.0.0d0) GOTO 3

```

```

A=DSQRT( DABS(B**2-(EE-U)**2+DMM**2) )
A1=DSQRT( DABS(B**2-(EE-U)**2+DMB**2) )
Q1=DSQRT( DABS(EE**2-B**2-DM1**2) )
Q2=DSQRT( DABS(EE**2-B**2-DM2**2) )

```

```

FN=(B-A)/(EE-U+DMM)
FP=(B+A)/(EE-U+DMM)
GN=(B-A)/(EE-U+DMB)
GP=(B+A)/(EE-U+DMB)

```

```

THETA=(2.0d0*WL1+WLB)/(2.0d0*WL)
DELTA=(2.0d0*WL2+WLB)/(2.0d0*WL)
SIGMA=WLB/(2.0D0*WL)

```

```

WMN=FN*(EE+DM1)*DSIN(Q1*THETA)
-B*DSIN(Q1*THETA)-Q1*DCOS(Q1*THETA)
WMP=FN*(EE+DM1)*DCOS(Q1*THETA)
-B*DCOS(Q1*THETA)+Q1*DSIN(Q1*THETA)

```

```

WNP1=GP*(EE+DM1)*DCOS(Q1*SIGMA)
-B*DCOS(Q1*SIGMA)+Q1*DSIN(Q1*SIGMA)
WNN1=GP*(EE+DM1)*DSIN(Q1*SIGMA)

```

$$-B*DSIN(Q1*SIGMA)-Q1*DCOS(Q1*SIGMA)$$

$$PP=FP*(EE+DM2)*DSIN(Q2*DELTA)$$

$$-B*DSIN(Q2*DELTA)+Q2*DCOS(Q2*DELTA)$$

$$PN=FP*(EE+DM2)*DCOS(Q2*DELTA)$$

$$-B*DCOS(Q2*DELTA)-Q2*DSIN(Q2*DELTA)$$

$$WNP1=GP*(EE+DM2)*DCOS(Q2*SIGMA)$$

$$-B*DCOS(Q2*SIGMA)-Q2*DSIN(Q2*SIGMA)$$

$$WNN1=GP*(EE+DM2)*DSIN(Q2*SIGMA)$$

$$-B*DSIN(Q2*SIGMA)+Q2*DCOS(Q2*SIGMA)$$

$$RP1=GN*(EE+DM1)*DCOS(Q1*SIGMA)$$

$$-B*DCOS(Q1*SIGMA)+Q1*DSIN(Q1*SIGMA)$$

$$RN1=GN*(EE+DM1)*DSIN(Q1*SIGMA)$$

$$-B*DSIN(Q1*SIGMA)-Q1*DCOS(Q1*SIGMA)$$

$$B2=WMP*DEXP(-A*THETA)/(WMN*DCOS(Q1*THETA)-WMP*DSIN(Q1*THETA))$$

$$D3=B2*(WMP*WNN1-WMN*WNP1)DEXP(A1*SIGMA)/(WMP*(EE+DM1)*(GN-GP))$$

$$F4=D3*(EE+DM2)*(GN-GP)*PNDEXP(A1*SIGMA)/(PP*WNP1-PN*WNN1)$$

$$H5=(F4*(PN*DSIN(Q2*DELTA))-PP*DCOS(Q2*DELTA))*DEXP(A*DELTA)/PN**2$$

3 RETURN



# Bibliografia

- [1] Graham T. Reed. "Device physics: The optical age of silicon". *Nature* **427**, 595 (2004).
- [2] Paul S. Peercy. "The drive to miniaturization". *Nature* **406**, 1023-1026 (2000).
- [3] N. M. Ravindra. "The drive for further miniaturization: Silicon nanoelectronics". *Journal of the Minerals*. **57**, 6 (2005).
- [4] Lanhua Wei, P. K. Kuo, R. L. Thomas, T. R. Anthony and W. F. Banholzer. "Thermal conductivity of isotopically modified single crystal diamond". *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3764. (1993).
- [5] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, "Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films", *Science* **306**, 666 (2004).
- [6] S. Iijima. "Helical microtubules of graphitic carbon". *Nature* **354**, 56 (1991).
- [7] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, and R. E. Smalley. "C60: Buckminsterfullerene". *Nature* **318**, 162 (1985).
- [8] Philip Richard Wallace. "The band theory of graphite", *Phy. Rev.* **71**, 622-634 (1947).
- [9] R.E. Peierls. "Quelques proprietes typiques des corps-solides", *Ann. I.H. Poincare* **5**, 177-222 (1935); L.D. Landau. "Zur Theorie der phasenumwandlungen II", *Phys. Z. Sowjetunion* **11**, 26-35 (1937).

- [10] L.D. Landau and E.M. Lifshitz. *Statistical Physics, Part I*, Pergamon Press, Oxford, 1980.
- [11] N.D. Mermin, "Crystalline Order in Two Dimensions", *Phys. Rev.* **166**, (1968).
- [12] <http://physics.bu.edu/~neto/mother.jpg>
- [13] S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, K. S. Novoselov, A. K. Geim and A. A. Firsov. "Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene". *Nature*, **438**:197-200, (2006).
- [14] Yuanbo Zhang, Joshua P. Small, William V. Pontius, and Philip Kim. "Fabrication and electric-field-dependent transport measurements of mesoscopic graphite devices". *Appl. Phys. Lett.* **86**, 073104, (2005).
- [15] Horst L. Stormer Yuanbo Zhang, Yan-Wen Tan and Philip Kim. "Experimental observation of the quantum hall effect and berry's phase in graphene". *Nature*, **438**:201-204, (2006).
- [16] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim. "Two-dimensional atomic crystals". *Proc. Natl. Acad. Sci.* **102** (30), (2005).
- [17] <http://www.condmat.physics.manchester.ac.uk/images/>
- [18] Claire Berger, Zhimin Song, Tianbo Li, Xuebin Li, Asmcrom Y. Ogbazghi, Rui Feng, Zhenfeng Dai, Alexei N. Marchenkov, Edward H. Conrad, Phillip N. First, and Walt A. de Heer. "Ultrathin epitaxial graphite: 2D electron gas properties and a route toward graphene-based nanoelectronics". *J. Phys. Chem. B* **108**, 19912-19916 (2004).
- [19] Walt A. de Heer, Claire Berger, Xiaosong Wu, Phillip N. First, Edward H. Conrad, Xuebin Li, Tianbo Li, Michael Sprinkle, Joanna Hass, Marcin L. Sadowski, Marek Potemski, G'erard Martinez. "Epitaxial graphene", *Solid State Communications* **143**, 92-100 (2007).
- [20] R.E. Peierls, *Helv. Phys. Acta Suppl.* **7**, 81 (1923).

- [21] M. I. Katsnelson, A. Fasolino, J. H. Los. "Intrinsic ripples in graphene". *Nature Materials*, **6**:652–655, (2007).
- [22] [www.sciencefriday.com/news/030107/graphene.jpg](http://www.sciencefriday.com/news/030107/graphene.jpg)
- [23] Yisong Zheng and Tsuneya Ando. "Hall conductivity of a two-dimensional graphite system". *Phys. Rev. B* **65**, 245420 (2002)
- [24] V. P. Gusynin and S. G. Sharapov. "Unconventional Integer Quantum Hall Effect in Graphene". *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146801 (2005)
- [25] M.I Katsnelson and K.S. Novoselov. "Graphene: new bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics". *Solid State Communications* **143** (2007)
- [26] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, "Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect, and edge shape dependence". *Phys. Rev. B* **54**, 17954 (1996).
- [27] William A. Fowler. "Experimental and theoretical nuclear astrophysics: the quest for the origin of the elements". *Rev. Mod. Phys.* **56**, (1984).
- [28] J. M. Hayes, A. J. Kaufman and A. H. Hickman. "Archean carbon isotopic abundances: New results and a commentary on the utility of the record ". *Origins of Life and Evolution of Biospheres*. **16**, (1986).
- [29] R. Saito, G. Dresselhaus, and M.S. Dresselhaus. *Physical Properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press, World Scientific, 1998.
- [30] [www.grandinetti.org/Teaching/Chem121/Lectures/Hybridization/assets/sp.gif](http://www.grandinetti.org/Teaching/Chem121/Lectures/Hybridization/assets/sp.gif)
- [31] [http://andromeda.rutgers.edu/~huskey/images/acetylene\\_bonds.jpg](http://andromeda.rutgers.edu/~huskey/images/acetylene_bonds.jpg)
- [32] [www.geocities.com/acegikmo1/organic/basic/ethene.png](http://www.geocities.com/acegikmo1/organic/basic/ethene.png)
- [33] F. Bloch. "The quantum mechanics of electrons in crystal lattices". *Zeitschrift für Physik*, **52**, 555 (1928).
- [34] Charles Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. Wiley- New York. (1996).

- [35] Neil W. Ashcroft and N. David Mermin, *Solid State Physics* Harcourt- Orlando. (1976).
- [36] James D. Patterson, Bernard C. Bailey. *Solid-state Physics introduction to the theory*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2007).
- [37] Y. F. Suprunenko, E. V. Gorbar, V. M. Loktev and S. G. Sharapov. "effect of next neighbor hopping on the electronic properties of graphene", *Low Temp. Phys.* **34**, 10 (2008).
- [38] N. M. R. Peres, F. Guinea and A. H. Castro Neto. "Electronic properties of disordered two-dimensional carbon". *Phys. Rev. B* **73**, 125411 (2006).
- [39] Deacon, R. S., K.-C. Chuang, R. J. Nicholas, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. "Cyclotron resonance study of the electron and hole velocity in graphene monolayers", *Phys. Rev. B* **76**, 081406 (2007).
- [40] J. W. McClure. "Band Structure of Graphite and de Haas-van Alphen Effect". *Phys. Rev.* **108**, 612 - 618 (1957).
- [41] Gordon W. Semenoff. "Condensed-Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly". *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2449 - 2452 (1984).
- [42] Chuanhong Jin, Fang Lin, Kazu Suenaga, and Sumio Iijima. "Fabrication of a Free-standing Boron Nitride Single Layer and Its Defect Assignments". *Phys. Rev. Lett.* **102**, 195505 (2009).
- [43] G. Giovannetti, Petr A. Khomyakov, G. Brocks, P. J. Kelly, and J. van den Brink. "Substrate-induced band gap in graphene on hexagonal boron nitride: Ab initio density functional calculations". *Phys. Rev. B* **76**, 073103 (2007).
- [44] Kostya Novoselov. "Graphene: Mind the gap". *Nature Materials* **6**, 720 - 721 (2007).
- [45] J Viana Gomes and N M R Peres. "Tunneling of Dirac electrons through spatial regions of finite mass". *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 325221 (2008).

- [46] A. Damascelli. "Probing the Electronic Structure of Complex Systems by ARPES". *Physica Scripta* **T109**, 61-74 (2004).
- [47] S.Y. Zhou, G.-H. Gweon, J. Graf, A.V. Fedorov, C.D. Spataru, R.D. Diehl, Y. Kopelevich, D.-H. Lee, S. G. Louie, and A. Lanzara, "First direct observation of Dirac fermions in graphite". *Nature Phys.* **2**, 595 (2006).
- [48] A. Bostwick, T. Ohta, T. Seyller, K. Horn, and E. Rotenberg, "Quasiparticle dynamics in graphene". *Nature Phys.* **3**, 36 (2007).
- [49] S.Y. Zhou, G.-H. Gweon, A.V. Fedorov, P.N. First, W.A. de Heer, D.-H. Lee, F. Guinea, A.H. Castro Neto, and A. Lanzara, "Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene". *Nature Mat.* **6**, 770 (2007).
- [50] S.Y. Zhou, D.A. Siegel, A.V. Fedorov, F. El Gabaly, A.K. Schmidt, A.H. Castro Neto, and A. Lanzara, "Origin of the energy bandgap in epitaxial graphene". *Nature Mat.* **7**, 259 (2008).
- [51] J. Milton Pereira, Jr., V. Milnar, F. M. Peeters and P. Vasilopoulos. "Confined states and direction-dependent transmission in graphene quantum wells". *Phys. Rev. B* **74**, 045424 (2006).
- [52] N. M. R. Peres, A. H. Castro Neto, and F. Guinea. "Dirac fermion confinement in graphene". *Phys. Rev. B* **73**, 241403 (2006).
- [53] P. G. Silvestrov and K. B. Efetov. "Quantum Dots in Graphene". *Phys. Rev. Lett.* **98**, 016802 (2007).
- [54] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim. "The electronic properties of graphene". *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [55] Walter Greiner. *Relativistic quantum mechanics wave equations*. 3rd edition Springer-verlag Berlin Heilderberg New york.
- [56] O. Klein "Die reflexion von elektronen an einem potentialsprung nach der relativistischen dynamik von Dirac" *Z. Phys* **53**, 157-165, (1929).

- [57] M. Katsnelson, K. Novoselov, and A. Geim, "Chiral Tunneling and the Klein paradox in graphene". *Nat. Phys.* **2**, 620, (2006).
- [58] Çalar Girit, V. Bouchiat, O. Naaman, Y. Zhang, M. F. Crommie, A. Zettl, and I. Siddiq. "Tunable Graphene dc Superconducting Quantum Interference Device". *Nano Lett.*, **9**, pp 198–199 (2009).
- [59] L. Brey and H. A. Fertig. "Electronic states of graphene nanoribbons studied with the Dirac equation". *Phys. Rev. B* **73**, 235411 (2006).
- [60] C. W. J. Beenakker, R. A. Sepkhanov, A. R. Akhmerov, and J. Tworzydło. "Quantum Goos-Hänchen Effect in Graphene". *Phys. Rev. Lett.* **102**, 146804 (2009).