

# UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL

### **ESTADO DE MORELOS**

# Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería

Propiedades espintrónicas en un nano-dispositivo basado en el siliceno

# TESIS

### Para obtener el Título de: Ingeniero Eléctrico

**Presenta:** Luis Ángel Rodríguez García

> **Director de tesis:** Dr. Outmane Oubram



Cuernavaca, Mor.

Noviembre, 2020

ii

### FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS e INGENIERÍA



Programas educativos de calidad reconocidos por CIEES, CACEI y CONACYT SGC certificado en la norma ISO 9000:2015



Cuernavaca, Morelos, a 15 de octubre de 2020

FORMA T-4 NOMBRAMIENTO COMITÉ REVISOR

DR. OUTMANE OUBRAM DR. LUIS CISNEROS VILLALOBOS DR. J GUADALUPE VELASQUEZ AGUILAR DR. MARIO LIMÓN MENDOZA ING. GERARDO DE JESÚS GONGORA CHICUELLAR

### PRESENTE

Me permito comunicarles que han sido designados integrantes del COMITÉ REVISOR del trabajo de:

TESIS

Titulado:

#### Propiedades espintrónicas en un nano-dispositivo basado en el siliceno

Que presenta (el) o (la) C. RODRÍGUEZ GARCÍA LUIS ÁNGEL

Del programa educativo de: INGENIERÍA ELÉCTRICA

A T E N T A M E N T E Por una humanidad culta

### DRA. VIRIDIANA A. LEÓN HERNÁNDEZ ENCARGADA DE DESPACHO DE LA DIRECCIÓN DE LA FCQeI

**FIRMA ELECTRONICA** 

### DICTAMEN

#### DRA. VIRIDIANA A. LEÓN HERNÁNDEZ ENCARGADA DE DESPACHO DE LA DIRECCIÓN DE LA FCQeI P R E S E N T E

En respuesta a su amable solicitud para emitir DICTÁMEN sobre el trabajo que se menciona, me permito informarle que nuestro voto es:

νοτο	NOMBRE	FIRMA
	DR. OUTMANE OUBRAM	
	DR. LUIS CISNEROS VILLALOBOS	
	DR. J GUADALUPE VELASQUEZ AGUILAR	
	DR. MARIO LIMÓN MENDOZA	
	ING. GERARDO DE JESÚS GONGORA CHICUELLAR	

C.c.p. – Archivo.

Av. Universidad 1001 Col. Chamilpa, Cuernavaca Morelos, México, 62209 Tel. (777) 329-70-00 Ext. 7039/ fcqei@uaem.mx





Una universidad de excelencia



Se expide el presente documento firmado electrónicamente de conformidad con el ACUERDO GENERAL PARA LA CONTINUIDAD DEL FUNCIONAMIENTO DE LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS DURANTE LA EMERGENCIA SANITARIA PROVOCADA POR EL VIRUS SARS-COV2 (COVID-19) emitido el 27 de abril del 2020.

El presente documento cuenta con la firma electrónica UAEM del funcionario universitario competente, amparada por un certificado vigente a la fecha de su elaboración y es válido de conformidad con los LINEAMIENTOS EN MATERIA DE FIRMA ELECTRÓNICA PARA LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE ESTADO DE MORELOS emitidos el 13 de noviembre del 2019 mediante circular No. 32.

#### Sello electrónico

VIRIDIANA AYDEE LEON HERNANDEZ | Fecha:2020-10-19 12:55:45 | Firmante

KJRHS0gZRmQaQt9rKuQHpWZ/I+zpM3LAHkmTNIsmcUWZUOpvec/lj0uA9/X8pgnQsxNTumwNk+igm81T5LVWQMZnpaUHRAS5q8Pfbq6B5/CbStb6/Rxz2HbkketRnQGrLFjTk8 mKm9Vu29RpnalmQycDart4jgr7t5nNYF98oQ/05xJMEsAb/+pSSMGtEJVX8xJ6dq4wIVWAkhik9ss2HurCT0RQzC0MEMxtImQIYTqusP3woM1kk7wN0SbO5oCJL0XxeF7uFytEm udhcJZCMcVu5gWi1HXAFELtz9DiEqxW7PmFdDsVJWGDeTOzuASWr5YYWY7OnDRMYHn0wXLZQQ==

> Puede verificar la autenticidad del documento en la siguiente dirección electrónica o escaneando el código QR ingresando la siguiente clave:



8laxcG

https://efirma.uaem.mx/noRepudio/dVcVr08b83aO4MNjNp3hLNZeeTzrFVIm



Una universidad de excelencia



Se expide el presente documento firmado electrónicamente de conformidad con el ACUERDO GENERAL PARA LA CONTINUIDAD DEL FUNCIONAMIENTO DE LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS DURANTE LA EMERGENCIA SANITARIA PROVOCADA POR EL VIRUS SARS-COV2 (COVID-19) emitido el 27 de abril del 2020.

El presente documento cuenta con la firma electrónica UAEM del funcionario universitario competente, amparada por un certificado vigente a la fecha de su elaboración y es válido de conformidad con los LINEAMIENTOS EN MATERIA DE FIRMA ELECTRÓNICA PARA LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE ESTADO DE MORELOS emitidos el 13 de noviembre del 2019 mediante circular No. 32.

#### Sello electrónico

#### LUIS CISNEROS VILLALOBOS | Fecha: 2020-10-19 16:42:52 | Firmante

QTH+t3sMgRDdsI6vHBRBvvjBYg7l4072hPPIIFFPUgVvpJ6FbjlM+J8h7Nj4l2zWxmwnGWINSjdgIU7HoxtkV/Zzmx9vjSPAH8bBQ8Xj11scyLSbiYu+BWybMPQiNV5rwVMaTKb2D ambYeCQRXj1lH7ReKvF1ukif2oJms8w8JvoP6UFHjSld3OMCScOlvPsEJuQarTv+bBrqcA+Z8AYtUfwZYCIku5jPTJ7urPdpDTnUxL+5gvrU8M62TKqlFsQldUBuMN1nIILNd69C0Q 57d/i8MerYB/9FEphIgDb4PEu6kiroA9+JI+M/3O13Ryl/SoHNpKFAzIjeYjCHjNQUA==

#### J GUADALUPE VELASQUEZ AGUILAR | Fecha: 2020-10-19 16:43:24 | Firmante

pmeN0sPYsak/gjT+yvfywd/OyFmT6S0r2ZwlfVchzlC715YWC65xrasay+lOiOWLgPdXDPqJ72vgO2vFHvZBBqO/kTPBSFlxn3/RUX7j6P2eBPzIJCyTeYo9pswruNhdj9KkjdwMM66 KHCAc7RQG4W0cx6C0sNwh95rnJYlsuDdP1CKnqhpkuGDXk4Fq5IEPguyMXLf0dgCiQGf4QRZ+GqLgkXeGQPn+j29XCnDjKeQOWcrlCgLCooXD5kSavy+qrUhL1DBbtrhEca/LU I3aNw2Q1S//dvbjq/AluYWUkCjNPuqj9Hg7VCtnGws1wsAYrKU3nZjZp7GIzIu5AWOK3g==

#### MARIO LIMON MENDOZA | Fecha:2020-10-19 17:51:11 | Firmante

ecc5EenCrUhN2dGhuBDSOtfk47FIAfTA4nk4Wsg29fQm222YW4GNBq3/5IBjiomQeJc3li0gRKmzUdHmxwT4P8hrgWyW/pV2FeJFOjpfRBxVcu+NIWBMXm8fv5JJTZ040d6L/0Y3 n7BafmYMLQbgITaKoB1g6MJHMuPyiRi9SvY/5gVBB8PSa/dETTs0Q2HcLly6HuSzxm7lk6k2yG2tsMw1204eNelEWolUrEzs5apOjQ+hpUI9GWfo6dL5uznFxan3kZ9qfyVqHNVTU 5C5TDZExCRlvGK7TsII7xh2ehVIMTZtI80ol6s3Bm7WC/3xorggtMqeJkIP1kQ/aEVZow==

#### GERARDO DE JESUS GONGORA CHICUELLAR | Fecha: 2020-10-19 23:22:37 | Firmante

H7zm0ekA4wBBoEbeEyobowfUl2l3ER8mljtSXof3UAD0mR8D2M19ncsZnfS+SCGxXTJlepuGDrlmxbweYHH2NXmZq4a50mlE570CpYnVT8qfVEpWYZHXsq4yIVY3pOb/3z7tHD pHKAysA4tA/bvZ8qFnO2tku2QDYyabblB5G1g4xWsj+tnBv3PqrLJunnJO0PVbJzoyONgooGk4JXj4r6WO6kr/2XgHvoxezVRhcWk55jSzvK06W1B/++eVCL1OD7xWWgC/PCn0hXl QoGjRtxfPAAo3M0zYhOC0+C21JReEZkh4ftSdPD3z+sQKQgFVm0lzSGls0Vq9EC0U5D1leg==

#### OUTMANE OUBRAM | Fecha: 2020-10-20 04:53:46 | Firmante

oB+jm5J+56+4t6jRDTcOl/KJwhbUMa5UfSF58mnCaC+YM+//FBTF8fuRe0Y9uJ+3tBHbt5U84+P5MOMS5y8Rb1r+jRVhgqyBs6ye+qfVOY65+Gy/qr7OJdO2RYdPPfp/qtUBDvKMu 2DkoZsqq9XPpm7z6sQaxs2hTQUzpv/Hux0J87jEj7LyljbvLlH+3Z3avkMWoY1oDIICx/41mPW0jPY+cZBYTp4DSeLo0hsJ2nUQGwuNro8GqnYbfwTwUEtFWmlfDUC4PQpvmLxn GbuaNneD3VWgKrYuxJqXrYfWsCjGnK8LZg0uV9YNrB/x3apr+k/hbNPsljV+IJPBJ4K7wQ==

#### Puede verificar la autenticidad del documento en la siguiente dirección electrónica o

escaneando el código QR ingresando la siguiente clave:



txzdEK

https://efirma.uaem.mx/noRepudio/hQ4loukZPBJCnCm5Y0SeTFhPFAF42K6G



Una universidad de excelencia

"Poco conocimiento hace que las personas se sientan orgullosas. Mucho conocimiento, que se sientan humildes."

# Leonardo da Vinci

Dedicada a los que estuvieron, están y estarán en mi vida.

### Agradecimientos

Gracias a todos los que creyeron en mí y están en esta etapa del camino de mi vida la cual me falta mucho por recorrer y una de las paradas del camino culminara con esta tesis.

Al Dr. Outmane Oubram por ser mi profesor durante mi vida universitaria y compartir sus conocimientos. También por ser mi asesor de tesis, por darme su tiempo, paciencia y su enseñanza para poder realizar esta tesis. Como también al Ing. Luis M. Rodríguez por darme la oportunidad de comenzar esta tesis en su materia de proyecto de ingeniería eléctrica.

Gracias al distinguido jurado, por su tiempo de leer esta tesis y evaluar mi desempeño, como también ser mis profesores y compartir sus conocimientos.

A los profesores que tuve durante toda mi carrera universitaria. A la FCQel por darme la oportunidad de estudiar y aprender la ingeniería en sus aulas. Como también a la UAEM por ser mi segunda casa y lograr ser un buen ciudadano y persona, y dar lo mejor de mí para México.

A mis padres, a mi mamá Susana que sin ella no hubiera llegado donde estoy y ser quien soy, la vida fue corta para ella, pero donde quiera que esté que su alma y memoria estén descansando en paz. A mi papá José Luis por apoyarme y darme ánimos de seguir adelante. A mi hermano Daniel por creer en mí y apoyarme, ayudarme en no dejarme caer y darme ánimos.

A mi familia, a mis tíos Rosa María y Moisés como a mi primo Diego que creyeron en mí y no me dejaron cuando más necesitaba apoyo, y estar siempre que los necesito. A mi abuelo Federico que su alma descanse y a mi abuela Guadalupe que siempre está al pendiente de mí y me apoyo para culminar mi carrera, como dar gracias también a mis tíos: Maricela y familia, Marisol y Roberto, Teresita y familia, Beatriz y familia, y Federico. Gracias a todos por su apoyo incondicional, material y sentimental, por todo lo que hicieron por mí durante estos años de vida. A las personas y familiares que me apoyaron dándome ánimos.

A mi mejor amigo Jasson y su familia por abrirme las puertas de su hogar y apoyarme cuando lo necesito.

A mi novia Iris por estar siempre conmigo en las buenas y las malas, por su amor, nunca dejarme solo y apoyarme en todo lo que hago y hare. Como también a su mama y hermana por abrirme las puertas de su hogar.

> "La textura del universo es la más perfecta y la obra de un creador sabio" Leonhard Euler

### <u>Resumen</u>

En esta tesis se estudia el fenómeno de espíntrónica utilizando un nano-dispositivo basado en siliceno un material bidimensional que evolucionara la industria de la electrónica como también en la vida humana. Como introducción de la tesis se dará una breve explicación sobre los tipos de materiales según la clasificación eléctrica de la materia. Se explicará que son los semiconductores, como conducen sus electrones y la importancia de los semiconductores en la electrónica, su conducción es muy peculiar en comparación a un conductor. En el semiconductor usado en el nano-dispositivo se puede decir que existen dos corrientes en una, esto por el movimiento de electrónica y espín, con esto se explicará la importancia del espín en este tipo de electrónica dando una explicación breve desde la mecánica clásica y la mecánica cuántica y también la historia de cómo fue descubierto este fenómeno natural de las partículas subatómicas.

Los materiales bidimensionales son muy importantes para la tecnología moderna ya que con ellas nos ayudaran en explorar y explotar al máximo su funcionamiento dentro de la electrónica dando una explicación de lo que son y explicando algunos materiales que existen. El siliceno es el material de interés en esta tesis ya que es el que se utiliza en el nano-dispositivo estudiado; dando una explicación histórica, sus aplicaciones y propiedades. Basándonos sobre el Hamiltoniano en bajas energías se puede describir el nano-dispositivo en el siliceno. Donde hemos logrado estudiar el transporte eléctrico (transmisión, conductancia y TMR) y determinado los parámetros favorables para tener mejores propiedades eléctricas del nano-dispositivo.

## <u>Objetivos</u>

Objetivo general: Entender el comportamiento de los electrones a través de simulaciones dando diferentes valores a las variables (campo magnético, campo eléctrico, numero de barreras, ángulo de propagación) para determinar la trasmisión, conductancia y TMR (magnetorresistencia túnel) en un nano-dispositivo hecho de un material bidimensional llamado siliceno, material compuesto por átomos de silicio.

Objetivos específicos:

- 1. Entender el termino de espíntrónica dentro de la rama de la electrónica.
- 2. Explicar que es el espín del electrón.
- 3. Conocer los materiales bidimensionales y explicar que es el siliceno.
- 4. Determinar las diferentes magnetorresistencias.
- 5. Dar a conocer la teoría de transporte de electrones en el nano-dispositivo basado en el siliceno.
- 6. Resultados por medio de simulaciones dando valores a las diferentes variables para determinar el comportamiento de los electrones en el nanodispositivo.

# <u>Contenido</u>

Dedicatoria	iii iv
Pagumon	······
Objetivos	v vi
Capítulo 1	
Introducción	1
1.1 Semiconductores:	1
1.1.1 Solidos cristalinos:	1
1.1.2. Clasificación eléctrica de la materia	2
1.1.3. Tipos de semiconductores:	3
1.2 Teoría de bandas de energía:	6
1.2.1 Banda de energía en semiconductores extrínsecos:	7
1.2.2 Conducción en semiconductores:	9
1.3 Espíntrónica:	11
1.3.1 Espín:	12
1.2 Red reciproca <i>K</i> :	20
1.2.1 Espacio reciproco <i>K</i> :	22
Capítulo 2	
Materiales bidimensionales	24
2.1 Materiales bidimensionales Xeno (x= Si, Ge, Sn, B, etc.):	24
2.1 Grafeno:	27
2.1.1. Propiedades del grafeno:	
2.1.2. Aplicaciones del grafeno:	29
2.2. Siliceno:	30
2.2.1 Propiedades del siliceno:	33
2.2.2 Aplicaciones del Siliceno:	33
2.3 Diferencia entre el siliceno y el grafeno:	35
Capítulo 3	
Magnetorresistencia	36
3.1 ¿Qué es la Magnetorresistencia?:	
3.2 Magnetorresistencia Clásica, CMR:	37

38
39
41
41
42
43
43
45
50
50
66
68
• • • • •

# <u>Capítulo 1</u>

# Introducción

### 1.1 Semiconductores:

Los dispositivos de estado sólido que actualmente se utilizan para la electrónica se fabrican con un tipo de material conocido como semiconductores que es natural en algunos elementos de la tabla periódica.

En el estudio de los semiconductores puede abordarse viendo desde dos puntos diferentes:

- Basándonos en la estructura cristalina del material, más preciso en su enlace covalente.
- Desde el punto de vista de la energía, es decir, a través de la teoría de bandas.

### 1.1.1 Solidos cristalinos:

La materia se compone por átomos, y estos a su vez se componen de partículas, en su núcleo se encuentra el protón que es la partícula positiva (+) y el neutrón la partícula neutra (0) el cual conforman la parte positiva del átomo, fuera del núcleo orbitan los electrones (-), que tiene una carga negativa, el electrón gira alrededor del núcleo como lo son los planetas a una estrella, los electrones se distribuyen en orbitas donde estos mismos no pueden tener su espín igual (se hablara más adelante sobre qué es el espín), esto, según el principio de exclusión de Pauli que indica que dos electrones de un átomo no pueden tener idénticos números cuánticos en el mismo nivel energético (orbital). La diferencia de propiedades químicas de los materiales se debe a las diferencias en sus átomos, mientras que, a sus distintas fases o estados de la materia (solido, liquido, gaseoso o plasma) de una misma sustancia viene ligado de que tan fuertemente estén unidos sus átomos.

Los átomos de un sólido toman un papel muy importante en la determinación de sus propiedades específicas. Los sólidos pueden tener tres tipos de estructuras, dependiendo del comportamiento atómico, y estos son: amorfo, cristalino o Policristalino. (Fig. 1). [1]

- Amorfo: No tiene orden atómico, esto es, que una zona del material ٠ no será igual a otra zona.
- Cristalino: Sus átomos están bien distribuidos formando un • conjunto tridimensional ordenado.
- Policristalino: El sólido está formado por subáreas cristalinas no • homogéneas entre sí.

# Clasificación basado en el grado de orden atómico



Figura 1.- Diferentes estructuras cristalinas de los sólidos.

### 1.1.2. Clasificación eléctrica de la materia:

Hay tres grupos y se clasifican por sus propiedades eléctricas (propiedades conductoras):

- Conductores: Se caracterizan por tener pocos electrones en su • capa de valencia, por lo que no necesita tanta energía para que los electrones bringuen de un átomo a otro, y su resistencia al paso de estos es muy bajo. Su resistividad es de  $\rho \approx 10^{-5} - 10^{-6} \Omega * cm$ aproximadamente, la mayoría de los metales son conductores estos son por ejemplo: Cobre (Cu), Hierro (Fe), Plata (Ag), Aluminio (Al), Oro (Au) y aleaciones.
- Aislantes: Se caracterizan por tener una resistencia muy alta, esto quiere decir que no conduce electrones tan bien como lo hacen los conductores. Algunos ejemplos de materiales aislante son

polímeros, Carbón (C), diamante, vidrio, madera y algunos plásticos. La resistividad de un aislante es  $\rho \approx 10^{18} \Omega * cm$ .

- Semiconductores: Se caracterizan por el uso que se puede dar ya sea como un conductor o un aislante, esto dependiendo de excitaciones externas, como el campo eléctrico, campo magnético, temperatura y presión. Este es el material más usado en la electrónica por sus diferentes usos en la conducción de electrones, ejemplos de materiales semiconductores son el Cadmio (Cd), Silicio (Si), Germanio (Ge), Selenio (Se). Su resistividad es de 10<sup>-3</sup> < ρ < 10<sup>5</sup> Ω \* cm aproximadamente, este material se clasifica en dos tipos de semiconductores, estos son:
  - 1.- Semiconductores intrínsecos.
  - 2.- Semiconductores extrínsecos.

### **1.1.3. Tipos de semiconductores:**

Intrínsecos: Son Semiconductores puros, sin impurezas en la red cristalina. La característica fundamental de un semiconductor puro es la igualdad de número de electrones libres y huecos a cualquier temperatura. Los semiconductores más usados son el Silicio y el Germanio, estos tienen 4 electrones de valencia (o última capa), solo se tomarán en cuenta estos electrones y las cargas positivas (huecos) que dejan tras el movimiento de estos, la conexión de átomos se hace por medio del enlace covalente, esto es la unión por medio de los electrones de valencia de cada átomo. A temperaturas bajas, todos los electrones de valencia permanecen ligados en los enlaces covalentes no disponiéndose de cargas libres que puedan mover por el cristal en presencia de un campo eléctrico, a este material se le conoce como aislante. A temperaturas altas, la vibración térmica de los átomos da lugar a movimientos bruscos en la que se "rompen" los enlaces covalentes, dejando cargas libres que se mueven en todo el cristal; la energía necesaria para romper un enlace covalente debe ser  $\geq E_G$  (banda prohibida o gap de energías= $E_C - E_V$ ), a temperatura ambiente (300 °K, 26.85 °C) el Silicio  $E_{G} \approx 1.12 \text{ eV}$  y el Germanio  $E_{G} \approx$ 0.7 eV. El espacio dejado en el enlace covalente se comporta como una partícula libre de carga positiva (~1.6x10<sup>-16</sup> C) y con una masa equivalente a la del electrón, este espacio recibe el nombre de "hueco" (h+). Cuando un enlace está incompleto, el electrón de un átomo vecino se liga al h<sup>+</sup> del enlace roto para ser llenado por él, una vez que el electrón se movió a llenar el h<sup>+</sup> ese electrón deja incompleto el enlace dejando otro h<sup>+</sup>, esto quiere decir que el h<sup>+</sup> se mueve en sentido contrario al electrón ligado. El movimiento del h<sup>+</sup> se puede considerar como la transferencia de partículas positivas de un átomo a otro efectuada por el movimiento de los electrones ligados entre sus enlaces covalentes, el electrón liberado inicialmente por la alta temperatura (vibraciones) no interviene en este proceso y puede desplazarse de manera independiente por el cristal, este se llama electrón de conducción. Los electrones de conducción y los huecos siempre se encuentran igual en números, ya que al romper un enlace covalente se crea un electrón de conducción y un h<sup>+</sup> que pueden moverse independientemente uno del otro (Fig. 2). [2,3]



Figura 2.- Conducción eléctrica en un semiconductor intrínseco.

**Extrínsecos:** Un semiconductor extrínseco o semiconductor dopado es obtenido mediante la composición de impurezas en los cristales de semiconductores intrínsecos (de forma controlada), esto para modificar las características eléctricas del semiconductor. Los semiconductores extrínsecos son los más usados en los dispositivos electrónicos y se derivan de dos tipos de semiconductores extrínsecos, los n (donadores) y p (aceptadoras), que se describirán a continuación:

Tipo n (donadores): Se ha sustituido un átomo del material semiconductor para colocar otro con 5 electrones de valencia (impureza), este átomo encaja bien en el cristal de silicio; 4 de los 5 electrones de valencia estarán fuertemente enlazados con los átomos del cristal, mientras que el quinto estará de débilmente enlazado con el átomo. A temperatura ambiente el electrón débil se libera con facilidad y se puede mover libremente por la red cristalina, siendo este un portador de carga (Fig. 3). Los elementos que tienen la propiedad de tener más electrones que huecos (h<sup>+</sup>),

por tener mayoría de electrones estos semiconductores son de tipo n (negativo). Los electrones de conducción son los portadores mayoritarios y los h<sup>+</sup> son los portadores minoritarios.

Ley de acción de masas: Esta ley demuestra que el producto de la concentración de electrones por huecos es siempre igual al cuadrado de la concentración intrínseca de electrones y/o huecos.

 $n * p = n_i^2$  Dónde: *p* son los portadores positivos (huecos) y *n* portadores negativos (electrones).



Figura 3.- Conducción eléctrica en un semiconductor tipo n.

 Tipo p (aceptadoras): Al dopar un semiconductor intrínseco con impurezas aceptadoras aumenta los huecos y disminuyen los electrones libres. El semiconductor tipo p (positivo) es el opuesto que el tipo n (negativo) ya que la mayoría son huecos y la minoría son electrones (Fig. 4). Cuando el quinto electrón de un átomo donador abandona a su átomo, el átomo adquiere una carga neta positiva (ion positivo).



Figura 4.- Conducción eléctrica en un semiconductor tipo p.

### 1.2 Teoría de bandas de energía:

En un semiconductor intrínseco, los electrones de valencia están conectados en sus enlaces covalentes, visto de la forma energética estos electrones se encuentran en una zona llamada banda de valencia el cual está sumamente saturada de estos. La banda superior se llama banda de conducción y en comparación con la de valencia está vacía ya que no hay electrones libres en el cristal, y en medio de estas dos bandas se encuentra una banda de estados no permitidos denominada banda prohibida o gap de energías (Fig. 5). [2,3]



Figura 5.- Esquema de bandas de energía.

- Aislantes: La banda prohibida en estos materiales es muy grande, se dispone de muy pocas cargas libres a temperatura de ~26°C siendo un mal conductor de electrones.
- Conductores: La banda de valencia y de conducción están sobrepuestas, esto quiere decir que no existe una banda prohibida, parcialmente siempre se tendrá una banda llena de electrones teniendo un movimiento de estos con una excitación externa de un campo eléctrico.

 Semiconductores: A temperatura ambiente es posible disponer de una cantidad estable de portadores de carga libres porque la banda prohibida no es tan masiva como la de un aislante, esto quiere decir que a temperatura ~26°C no son buenos aislante pero tampoco buenos conductores. En la figura 6 se puede ver la diferencia en las bandas de energía de los tres materiales.



Figura 6.- Esquema de bandas de energía de los tres tipos de materiales.

### 1.2.1 Banda de energía en semiconductores extrínsecos:

Como ya se había escrito hay dos tipos de semiconductores extrínsecos y estos son el tipo n y tipo p, y con ellos hay diferencia en la energía requerida para poder mover los electrones por la red cristalina:

> Tipo n: Como ya se sabe en los semiconductores de tipo n hay un electrón libre circulante por el cristal, esto quiere decir que este electrón no pertenece a la banda de valencia y ni a la banda de conducción. Si se le suministra una pequeña cantidad de energía al electrón este se convierte en un portador de carga por la red del cristal, para indicar su estado en un esquema de bandas de energía este electrón se situaría muy cercas de la banda de conducción. (Fig. 7)

#### Semiconductor tipo n



Figura 7.- Esquema de bandas de energía de un semiconductor tipo n.

 Tipo p: El estado de energía del enlace covalente no completo estará muy cerca de la banda de valencia, para que con poca energía los electrones puedan pasar con facilidad la banda de valencia, (Fig. 8)



Semiconductor tipo p

Figura 8.- Esquema de bandas de energía de un semiconductor tipo p.

A temperatura cercanas al cero absoluto todos los electrones están quietos, esto quiere decir que no brincan de la banda de valencia a la de conducción, al igual que los huecos estos tampoco brincan ya que al no tener una temperatura (energía) de excitación estos tienden a quedar quietos. A una elevada temperatura los electrones donadores brincan a la banda de valencia, mientras que los electrones en la banda de valencia a los aceptadores crean huecos en la misma banda y produciendo ionización en las impurezas. [2,3]

### 1.2.2 Conducción en semiconductores:

La corriente de arrastre en semiconductores sucede cuando se le excita con un campo exterior aplicado, como consecuencia los electrones libres del semiconductor se moverán, a diferencia de los conductores (metales) los semiconductores también mueven cargas positivas esto son los huecos, ya descritos. Al aplicar el campo eléctrico exterior se tendrá el movimiento de dos componentes, las de los electrones que se moverán a la dirección contraria al del campo y los huecos que se moverán en dirección del campo.

Cuando una carga es acelerada, ya sea por un campo eléctrico externo, esta genera una fuerza,  $\vec{F} = m^*\vec{a} \rightarrow q\vec{E} = m^*\vec{a} = \frac{m^*\vec{v}}{\tau} \rightarrow \vec{v} = \frac{q\vec{E}\tau}{m^*}$  Donde:  $\vec{F}$  es fuerza,  $m^*$  masa efectiva (Masa virtual del electrón),  $\vec{v}$  velocidad del electrón, q carga del electrón,  $\vec{E}$  campo eléctrico,  $\tau$  tiempo libre medio de un portador de carga.

• Electrones  $\vec{E}_e = \frac{(-e)\tau_e}{m_e^*}\vec{E} = \mu_e\vec{E}$   $\mu_e = -\frac{e\tau_e}{m_e^*}$  (1)

• Huecos 
$$\vec{E}_p = \frac{(+h)\tau_h}{m_h^*}\vec{E} = \mu_h\vec{E}$$
  $\mu_h = \frac{h\tau_h}{m_h^*}$  (2)

 $\mu$  representa la movilidad eléctrica de los electrones o huecos, esto excitado con un campo eléctrico hace que la partícula (electrón o hueco) tome velocidad para moverse en la red cristalina. Teniendo la velocidad de los electrones se puede calcular la corriente de arrastre total de las dos cargas (electrón y hueco).

$$I_a = I_{an} + I_{ap} = Anq_e v_e + Apq_h v_h = Anq_e \mu_e \vec{E} + Apq_h \mu_h \vec{E}$$
(3)

Reduciendo la ecuación: 
$$I_a = \left(nq_e\mu_e\vec{E} + pq_h\mu_h\right)A\vec{E} = \left(\frac{ne^2\tau^2}{m_e^*} + \frac{pe^2\tau_h}{m_h^*}\right)A\vec{E}$$
(4)

$$I_a = (electron + hueco)A\vec{E} = (f(q_e^2) + f(q_h^2))A\vec{E}$$
(5)

La ecuación de la corriente de arrastre indicara cuantos electrones y huecos pasan en un determinado tiempo cuando el cristal del semiconductor es excitado por un campo eléctrico exterior. Con las ecuaciones de corriente de arrastre se puede definir la conductividad y la densidad del material semiconductor para determinar la capacidad de movimiento de los electrones en el dicho material.

Densidad de corriente eléctrica: 
$$\vec{J} = \frac{I_a}{A} \rightarrow \vec{J} = \frac{\left(\frac{ne^2\tau_e}{m_e^*} + \frac{pe^2\tau_h}{m_h^*}\right)A\vec{E}}{A} = \left(\frac{ne^2\tau_e}{m_e^*} + \frac{pe^2\tau_h}{m_h^*}\right)\vec{E}$$
 (6)

La conductividad eléctrica es la capacidad de un material (en este caso un semiconductor) para poder pasar corriente sobre él, entonces podemos tomar la suma del movimiento de electrones y huecos como la capacidad de movimiento en la red cristalina  $\sigma = \left(\frac{ne^2\tau_e}{m_e^2} + \frac{pe^2\tau_h}{m_h^2}\right)$  por lo tanto:  $\vec{J} = \sigma \vec{E} \rightarrow \sigma = \frac{J}{\vec{E}}$  (7)

Corriente de difusión: La difusión de electrones en vacío o materia (semiconductor) es el movimiento en grupo, en un choque de estos electrones hay una probabilidad de que puedan moverse en cualquier dirección, lo que hace que haya un flujo de electrones de las regiones más pobladas a las menos pobladas con el fin de homogeneizar su concentración. La difusión se produce siempre que haya variaciones espaciales (gradiente) de la concentración de electrones. Como los electrones tienen carga, estos constituyen, una corriente eléctrica. En un semiconductor extrínseco existirá conducción por difusión ya sea en electrones o huecos (Fig. 9).



Figura 9.- Corriente de difusión positiva y negativa en material semiconductor.  $\vec{J}_{difusion} = -qD_n n \frac{dn}{dx} + qD_p p \frac{dn}{dx} = (-\vec{J}_n + \vec{J}_p) \rightarrow (8)$ 

 $I_d = A \left(-q D_n n \frac{dn}{dx} + q D_p p \frac{dn}{dx}\right) = A \left(-\vec{J}_n + \vec{J}_p\right)$  (9) (Sentidos opuesto como se ve en la figura 9). Donde:  $\vec{J}_{difusion}$  Densidad de corriente de difusión,  $\vec{J}_n$  Densidad de corriente de difusión de los electrones, n Concentración de electrones,  $\vec{J}_p$  Densidad de corriente de difusión de huecos,  $D_p$ 

Constante de difusión de los huecos, p Concentracion de huecos, q y - q cargas positiva y negativa (electrón y hueco).

En un semiconductor, la corriente total será la suma de las corrientes debidas al movimiento de las dos cargas (electrones y huecos), estas corrientes pueden ser de arrastres (por excitación de un campo eléctrico externo) y de difusión (debidas a un gradiente de impurezas). Si aumenta la temperatura, aumenta  $\sigma$  (conductividad eléctrica) y disminuye  $\rho$  (resistividad), esto quiere decir que con altas temperaturas la resistencia en semiconductores disminuye. [2,3]

### 1.3 Espíntrónica:

La espíntrónica es la rama de la electrónica que utiliza el magnetismo débil de los electrones generados por su espín (giro), la palabra espíntrónica es un conjunto de dos palabras, espín (giro) + trónica (electrónica). La espíntrónica fue anticipada por el físico y ganador del premio nobel de física Richard Feynman, en una conferencia en el que él participio, en el año de 1959, él comentaba que la tecnología se reduciría a tamaños atómicos, ese fue el primer concepto de la nanotecnología:

"Computadores con alambres no más anchos que 100 átomos, un microscopio que puede ver átomos individuales, máquinas que pueden manipular átomos uno a uno y circuitos que operan con niveles de energía cuantizada o las interacciones de los espines cuantizados..." Richard Feynman 1959. [4]

El nacimiento de la espíntrónica se les atribuye a dos físicos, al francés Albert Fred y al alemán Peter Grünberg por su contribución al descubrimiento de la magnetorresistencia gigante (se hablará más adelante) en el año de 1988, su descubrimiento fue independiente, mientras el señor Grünberg trabajaba con su equipo en Jülich Research Centre en Alemania con capas cristalinas de Fe/Cr/Fe, ese mismo año en Francia el señor Fred descubría el mismo fenómeno usando capas de Fe/Cr en la universidad de Paris-sur; posteriormente en el año 2007 la Academia Sueca los galardona con el premio Nobel de física por su descubrimiento. En 1994, el descubrimiento de la magnetorresistencia Gigante se comienza a aplicar en la industria de la automoción, y tres años más tardes la compañía de IBM ocupa la espíntrónica para desarrollar cabezas lectoras en discos duros de ordenadores de última generación, gracias a esto se lograría almacenar más información magnéticamente. La espíntrónica ayudara a que los dispositivos sean más rápidos en su procesamiento y aprovechar el calor (efecto Joule) mínimo que emanan, ayudando a empequeñecer los componentes electrónicos que conocemos en estos días, también en un futuro servir como unidades de procesamiento en la computación cuántica o mejorar la velocidad de las actuales computadoras. Con la ayuda de los materiales similares al grafeno, por ejemplo, el siliceno que ayudara en la conducción de los electrones por su semiconduccion, por ser una capa atómica de uniones de silicio dando un impulso en el desarrollo de estas nuevas tecnologías, dando por sentado que la espíntrónica es la herramienta tecnológica del futuro y un gran campo de investigación y aplicación en la vida científica y cotidiana. [5,6,7]

### 1.3.1 Espín:

El espín de una partícula es una propiedad natural, esto quiere decir que giran en su propio eje como si un planeta se tratara. El espín (giro) tiene un momento angular con un valor fijo; como se sabe en la materia hay dos tipos de partículas el cual son los fermiones y bosones. Los bosones son las partículas encargadas de trasmitir las fuerzas, esto son los fotones en el electromagnetismo, el gluon de la fuerza fuerte, Z y W de la fuerza débil y el bosón de Higgs encargada de dar masa a las partículas fundamentales, también hay una hipótesis que indica que la gravedad tiene su propio bosón llamado gravitón, las características de los bosones son que su espín toma valores enteros (0, 1, 2), no se cumple la exclusión de Pauli en ellos esto quiere decir que no hay una barrera o un número cuántico que indique cuantos bosones pueden ver en un nivel de energía, y siguen la estadística de Bose-Einstein. En la figura 10 se puede ver el modelo estándar de partículas. [8,9]

<u>12</u>



Las tres generaciones de la Materia (Fermiones)

Figura 10.- Modelo estándar de las partículas con sus respectivos números cuánticos.

La partícula más estudiada y utilizada en la electrónica es el electrón, el electrón está en una familia con más partículas similares a él, llamados fermiones, que a su vez se dividen en dos tipos distintos, que son los quarks y los leptones. Los fermiones se caracterizan por tener espines semi-enteros (1/2, 3/2) y son las partículas fundamentales de la materia, ya que con la unión de quarks se crean las partículas de los núcleos atómicos, y que son capaces de experimentar la interacción nuclear fuerte; y los leptones son las partículas que interactúan básicamente con la interacción electrodébil como son los electrones. Los fermiones obedecen al principio de exclusión de Pauli, esto quiere decir que no puede ver más de dos fermiones con todos sus números cuánticos idénticos dentro del mismo sistema cuántico, y obedecen a la estadística Fermi-Dirac. Para entender mejor que es el espín se comenzara explicando que es el momento angular en la mecánica cuántica y el numero cuántico espín. [8,9]

**Momento angular en mecánica clásica**: El momento angular es muy útil para describir movimientos en dos o tres dimensiones y rotaciones. Se considera el movimiento de una masa m en un punto con respecto a O (origen), el movimiento de la masa describe un circulo alrededor del punto de origen. La masa al tener una

velocidad tiene una cantidad de movimiento, esto es  $\vec{p} = \vec{v}m$  (10), pero como se indicó el movimiento de esta masa es circulante alrededor del origen esto quiere decir que tiene un radio de movimiento (Fig. 11).



Figura 11.- esquema del momento angular de una masa.

Siendo *r* el vector que une el origen con la masa, el producto resultante del radio con la cantidad de movimiento da un vector perpendicular con respecto al plano,  $\vec{L} = r \times \vec{p} = r \times (\vec{v}m)$  (12) siendo  $\vec{L}$  el momento angular o cinético de la masa; su momento angular dependerá de lo cerca o alejado que este la masa de su origen. Este efecto de momento angular también se ve en las partículas como el electrón, siendo el momento angular orbital o momento angular propio del electrón (espín). El momento angular visto desde la mecánica cuántica es más complicado de entender ya que se necesitan matemáticas más avanzadas y leyes diferentes a las que se aplica en la mecánica clásica. [10]

**Momento angular en mecánica cuántica:** Cuando se observa las líneas espectrales de un átomo de hidrogeno ionizado, la ecuación de Schrödinger responde bien a la energía que este desprende y también a la explicación de las líneas que se observan en espectrómetros de baja resolución. En cambio, cuando se usa un espectrómetro de alta resolución y se observa nuevamente estas líneas en la onda de mayor longitud se observa que esta se divide en dos líneas, nombrándolo como doblete. En 1925 los físicos Goudsmit y Uhlenbeck comprendieron y teorizaron el comportamiento de estas líneas y también el entendimiento del experimento Stern y Gerlach (más adelante se explicará), estos vieron los dobletes como dos diferentes estados (1 y 0) del momento angular en la traslación. Para ello se imaginaron que el electrón tiene un momento angular propio,

dando un nuevo número cuántico asignado como S = 1/2, con este nuevo concepto se podría explicar mejor las anomalías en el doblete. Con esta idea Goudsmit y Uhlenbeck pensaron que el electrón tiende a girar en su propio eje (momento angular) como lo hace la tierra, pero en cambio este es intrínseco (propio) natural del electrón, nada lo genera. La tierra gira por la fuerza gravitatoria, pero el electrón gira por ser su naturaleza, y este fenómeno le fue nombrado espín o spin. Teniendo un cuidadoso análisis, el espín de cualquier partícula es muy complejo de entender y muestra que esta propiedad intrínseca no se debe considerar como un giro real de la partícula sobre sí misma, aunque esta idea física de su rotación resulta ser muy útil en teoría y se tiene que tener cuidado de cómo se representa. El electrón al circular por el núcleo en su momento angular, genera un momento magnético orbital, desde el punto de vista del electromagnetismo clásico se puede visualizar como un devanado electrificado. Si existe una corriente I alrededor del devanado con una superficie dS, entonces su momento magnético d $\mu$  esta dada por la ecuación  $d\mu = IdS$ . Este principio se puede usar para el momento magnético orbital considerando al electrón más externo del átomo (electrón de valencia), ocupando la ecuación de la física clásica  $d\mu = IdS$  (13), se puede deducir el momento magnético orbital.  $d\mu_L = IdS$ , siendo  $I = \frac{(-e)\vec{v}}{2\pi r}$  y  $S = \pi r^2$ , el electrón describe una circunferencia alrededor del núcleo. Sustituyendo estos valores en la ecuación  $\mu_l = -\frac{e\vec{v}\pi r^2}{2\pi r} =$  $-\frac{em_e\vec{v}r}{2m_e}$ , recordar que  $\vec{L} = r \times \vec{P} = r \times m\vec{v}$  (12) esto es el momento angular, por lo tanto simplificando las magnitudes del dividendo queda  $\mu_l = -\frac{e}{2m_e}\vec{L}$ . La representación de los momentos magnéticos (Fig. 12). [8,9]



Figura 12.- Momento magnético orbital  $\mu_l$  es creado por el momento angular *L* que describe el electrón alrededor del núcleo atómico, el momento magnético se orienta contrariamente al momento angular. El momento magnético del electrón  $\mu_s$  es provocado por el espín *S* que este tiene, al igual que el momento magnético orbital, el momento magnético del electrón se contrapone al espín.

Dándole Valores cuánticos a  $\vec{L}$ , sustituyendo la masa y la velocidad da una nueva entidad llama operador  $\hat{L} = r \times \vec{P} = -i\hbar(r \times \nabla)$  (14), siendo  $\hbar = \frac{\hbar}{2\pi}$  la constante de Planck. En el caso que el operador  $\hat{L} = 0$ ; se cuantifica siendo  $L = \sqrt{L(l+1)\hbar}$ , (15) siendo l el número cuántico azimutal, toma valores  $l = 0, \pm 1, \pm 2, ..., \pm l$ . El electrón al ser una partícula cargada genera también un momento magnético propio esto provocado por su espín, este mismo principio en la física clásica se puede observar con el electrón, solo que con distintas reglas matemáticas. Si el electrón se comportara como una corriente, la relación del momento magnético del espín  $\mu_S$  y el momento angular del espín *S* sería la misma entre el momento magnético orbital  $\mu_{\vec{L}}$  y el momento angular orbital  $\vec{L}$ . Goudsmit y Uhlenbeck desarrollaron la ecuación que determina cuanto es el momento magnético del espín y esta es  $\mu_S = -g \frac{e}{2m}S$ , en la figura 12 se observa que los momentos magnéticos se contraponen al momento angular orbital y al espín, esto se puede entender por qué se le asigna el signo negativo a los momentos magnéticos.

Donde *e* es la carga del electrón, *g* es una constante de proporcionalidad conocida como factor de Landé, cuyo valor para el electrón es 2.0024 o  $g \cong 2$  y *S* es el numero cuántico de espín. El signo negativo que se le da es porque el momento magnético del espín tiene un sentido opuesto al espín *S*. El momento dipolar magnético total del electrón en su órbita es la suma vectorial de los dos momentos magnéticos, esto es  $\mu_T = \mu_{\vec{L}} + \mu_S = -\frac{e}{2m_e}\vec{L} + -g\frac{e}{2m}S = -\frac{e}{2m}(\vec{L}, +gS)$  (16), esta ecuación no solo depende de *L* y *S*, sino también de las orientaciones relativas de los momentos. En la figura 13 se pueden ver las líneas magnéticas que crean los momentos magnéticos de ambos fenómenos. [8,9]



Figura 13.- Momento magnético asociado a) a la órbita del electrón y b) al espín del electrón.

#### **1.3.1.1 Experimento de Stern-Gerlach:**

En 1922 los físicos Otto Stern y Walter Gerlach desarrollaron un experimento muy útil para el entendimiento de partículas cargadas, que posteriormente en 1925 Goudsmit y Uhlenbeck entendieron él porque de los resultados obtenidos y el entendimiento pleno del experimento, llegando a la conclusión que el electrón tiene un momento magnético provocado por un momento angular intrínseco el cual lo denominaron espín. Al experimentar en un campo magnético no homogéneo o inhomogéneo, al colocar un pequeño imán sobre este campo, el pequeño imán sentirá una fuerza que desplace o lo desvié, esto dependerá de la orientación que tenga. El electrón se comporta como ese pequeño imán ante campos magnéticos, esto es porque el electrón si se recuerda tiene un momento magnético total  $\mu_T$ , esto provocado por su momento magnético orbital  $\mu_l$  y su momento magnético intrínseco provocado por su espín  $\mu_S$  (esto ya explicado en el subtema 1.3.1). [8,9]

En el experimento de Stern y Gerlach se hace pasar un haz de átomos hidrogenoides (átomos formados por un núcleo y un solo electrón) por un campo magnético no homogéneo, el efecto de que tiene este campo con el dipolo magnético es una fuerza ejercida cuyo modulo y dirección dependerá de la orientación del campo respecto al dipolo. Esto es, si el dipolo magnético es paralelo al campo magnético no homogéneo, el dipolo tiende a desplazarse a la dirección en la que el campo aumenta, mientras que, si el dipolo es antiparalelo al campo magnético no homogéneo, el dipolo se desplazara en dirección en el que el campo disminuya. En la figura 14 se puede observar ilustrado el experimento. Si los átomos hidrogenoides se encuentran en su estado de baja energía (estado fundamental), el momento angular orbital es cero L = 0, por lo tanto, el momento magnético orbital  $\mu_L = 0$ , esto quiere decir que el momento magnético total será provocado por el momento magnético del electrón provocado por el espín. El campo magnético no homogéneo desviará al haz atómico dependiendo de la orientación del momento del dipolo magnético  $\mu_{s}$ , esto quiere decir que dependerá de la orientación del vector momento angular del espín S. [8,9]



Figura 14.- En el esquema se puede observar la forma que tiene el imán, este es el que provoca el campo magnético no homogéneo, esta forma peculiar que tiene el imán sirve para que la intensidad del campo aumente en el sentido de sur a norte. En el detector se ve la predicción que tenían los físicos al llegar, al no saber que los átomos se comportan como un dipolo magnético. Pero el resultado fue la desviación hacia arriba y hacia abajo de los átomos.

El Resultado que se tuvo fue que el campo magnético desdobla el haz de átomos en dos direcciones, llegando a la conclusión que el espín del electrón puede tener dos orientaciones posibles ante un campo magnético, y esto es que sea paralelo o antiparalelo al campo. Como se ha determinado el número cuántico del espín s tendrá dos orientaciones en dirección de z, deberá cumplirse entonces 2s + 1 = $2 \rightarrow s = \frac{1}{2}$ , esto teorizado por Goudsmit y Uhlenbeck en 1925. Denominando  $m_s$  al número cuántico que corresponde al momento angular intrínseco del espín orientado en al momento angular intrínseco del espín orientado en z del espacio euclídeo, entonces se tendrá que  $m_s$  toma dos valores medios esto es  $+\frac{1}{2}$  y  $-\frac{1}{2}$ . Las magnitudes que toma el momento angular de espín S, y su componente z, vendrán dadas por  $S = \sqrt{s(s+1)}\hbar$ , recordar que  $s = \frac{1}{2}$ , por lo tanto, queda  $S = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$ . La ecuación dada para S con componente en z que da de esta forma  $S_z = m_s \hbar$ donde  $m_s = \pm \frac{1}{2}$ . Si  $m_s = -\frac{1}{2}$ , este recibe el nombre de spin Down (espín abajo) o también llamado antiparalelo y si  $m_s = +\frac{1}{2}$  se le llamara spin Up (espín arriba) o paralelo, en la figura 15 se puede observar la diferencia respecto a la orientación del campo magnético del electrón. [8,9]



Figura 15.- Orientación del campo magnético del electrón, esto dependiendo del valor que se tenga del espín. A la izquierda se encuentra el electrón up y a la derecha el electrón down.

### 1.3.1.2 Interacción Espín-Orbita:

El electrón en términos resumidos, posee un momento angular orbital  $(\hat{L})$  y un momento angular intrínseco o espín (*S*). Análogamente se puede ver en sistemas clásicos, por ejemplo, en el movimiento de la tierra, esta gira alrededor del sol creando un momento orbital (traslación) y su momento angular propio de la tierra (rotación), este ejemplo sirve para imaginar el comportamiento que realizan los electrones. El momento angular total visto en la mecánica clásica es la suma vectorial de ambos momentos del sistema, esto es  $J = \hat{L} + S$ , en momento angular total *J* es importante porque debido a su variación en el tiempo coincide en el momento de fuerzas que actúan en el sistema, en caso que las fuerzas ejercidas sean nulas, el momento angular total se conserva. En mecánica clásica el módulo de *J* puede tener cualquier valor comprendido entre  $|\hat{L} - S| \neq |\hat{L} + S|$ , visto ahora desde el punto de la mecánica cuántica *L* y *S* están cuantizados y las direcciones del módulo están restringidas. [11]

En la mecánica cuántica no es tan sencillo combinar el momento angular orbital y el momento angular del espín, para esto se necesitan unas reglas matemáticas diferentes a las que rigen los sistemas clásicos. Para el caso del electrón, la combinación de su momento angular orbital y su espín, el momento angular total de estos momentos tendrá un modulo  $J = \sqrt{j(j+1)}\hbar$ , donde el número cuántico *j* podrá tener los valores j = |l+s| o j = |l-s|. Si l = 0, [11] el único valor que se tomaría es el valor de espín, por lo tanto, solo se tiene un valor para el momento angular, esto quiere decir que  $j = s = \frac{1}{2}$ . Pero si  $l \neq 0$ , por ejemplo, darle la unidad a l, *j* tendrá valores  $j = \frac{2}{3}$  y  $j = \frac{1}{2}$ . Con la ayuda de la notación espectroscópica, los estados cuánticos del átomo de hidrogeno se representa con un símbolo  $n^{2s+1}l_j$ , puesto que hablamos de electrones  $s = \frac{1}{2}$ , quedando la notación como  $n^2l_j$ , donde *n* es el número cuántico principal, *l* el numero cuántico orbital y *j* es el número cuántico asociado al momento angular total. Se acostumbra en remplazar *l* con letras mayúsculas, y estas tendrán valores numéricos enteros:

l =	0	1	2	3	4
Símbolo:	S	Ρ	D	F	G

Utilizando lo anterior en el átomo de hidrogeno esto da  $1^2S_{1/2}$  ya que l = 0 y j solo tiene valores  $\frac{1}{2}$ . Para el número cuántico principal n = 2 y se tienen los valores l = 0 y i = 1. Si l = 0 entonces se tienen valores  $j = \frac{1}{2}$ ,  $j = \frac{1}{2}$  y  $j = \frac{2}{3}$ , por lo tanto, para n = 2 se tendrán estados  $2^2S_{1/2}$ ,  $2^2P_{1/2}$  y  $2^2P_{2/3}$ . En átomos con el mismo valor en el número cuántico principal n y numero cuántico j, pero con diferente número cuántico l en sus estados, tienen una energía similar, esto es  $2^2S_{1/2} \cong 2^2P_{1/2}$ . Pero cuando dos átomos tienen estados n y l igual, pero distinto j tienen una ligera diferencia de energía, esto es por la interacción del espín del electrón con su momento angular

orbital. Este efecto que se tienen es la interacción Espín-Orbita, esto se ve, por ejemplo, en que  $2^2 P_{1/2} > 2^2 P_{2/3}$ , pero muy sutilmente.

### 1.2 Red reciproca K:

Un cristal es un conjunto de átomos o moléculas que se repiten de manera ordenada e indefinida, el cristal se forma con la unión de una red cristalina y una base atómica. En la figura 16 se tiene una red cristalina y una base atómica, si se coloca la base atómica (esto quiere decir átomos de cualquier elemento) en los puntos señalados en la red cristalina el resultado da un cristal del elemento que se tomó como base.



Figura 16.- Unión de la base atómica con una red cristalina da como resultado un cristal, la dimensión dependerá del tipo de red que se utilice, esto podría ser de unidimensional, bidimensional o tridimensional.

Un concepto básico en la descripción de cualquier solido cristalino es la de la red de Bravais, las bases pueden ser cualquier tipo de materia, pero la red de Bravais resume solo la geometría de la estructura periódica de la red cristalina. La red de Bravais se puede definir en dos conceptos:

- Una red de Bravais es un conjunto infinito de puntos con un orden de posición y orientación que parecen iguales, desde cualquier punto de vista que se pueda observar.
- Una red de Bravais tridimensional consiste en todos los puntos de vectores de posición *R* de la forma: *R* = n<sub>1</sub>*a*<sub>1</sub> + n<sub>2</sub>*a*<sub>2</sub> + n<sub>3</sub>*a*<sub>3</sub>, siendo *a*<sub>1</sub>, *a*<sub>2</sub> y *a*<sub>3</sub> vectores primitivos de la red tridimensional, y n<sub>1</sub>, n<sub>2</sub> y n<sub>3</sub> son todos los valores. De esta manera, llega al punto ∑ n<sub>i</sub>a<sub>i</sub> moviendo n<sub>i</sub> pasos de longitud a<sub>i</sub> en la dirección de *a<sub>i</sub>* para *i* = 1, 2 y 3.

La red recíproca es un concepto fundamental en la mayor parte de los estudios analíticos de estructuras periódicas. Considere un conjunto de puntos R que constituye una red de Bravais y una onda plana,  $e^{iK*r}$ . Para general K, tal onda plana no tendrá la periodicidad de la red de Bravais, sino que, para ciertas elecciones especiales, si es un vector, la tendrá. El conjunto de todos los vectores de onda K que producen una onda plana con la periodicidad de una determinada red de Bravais se conoce como su red recíproca. K pertenece a la red reciproca de una red de Bravais de puntos **R**, siempre que la relación sea:  $e^{iK*(r+R)} = e^{iK*r}$ . Se mantiene para cualquier r, y para toda R en la red de Bravais. La factorización de  $e^{iK*r}$ , se puede caracterizar la red reciproca como un conjunto de vectores K que satisface la ecuación  $e^{iK*R} = 1$ , para toda **R** en la red de Bravais. Se toma en cuenta que una red recíproca se define con referencia a una red Bravais particular. La red de Bravais determina un reciproco dado. El hecho de que  $K_1 y K_2$  satisfacen a  $e^{iK*r}$ , también lo harán su suma y diferencia. Siendo  $a_1$ ,  $a_2$  y  $a_3$  vectores primitivos para la red cristalina. Entonces, con la ayuda de estos vectores primitivos se puede generar la red recíproca:

$$\boldsymbol{b}_1 = 2\pi \frac{\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{a}_1 \ast (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)} \quad (17)$$

$$b_2 = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{a_1 * (a_2 \times a_3)}$$
 (18)

$$\boldsymbol{b}_3 = 2\pi \frac{\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{a}_1 \ast (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)} \quad (19)$$

Para saber que el conjunto de vectores proporciona a la red recíproca, debe  $b_i$  satisfacer:  $b_i * a_j = 2\pi \delta_{ij}$ . (Recordar que cuando  $i \neq j$ , el producto cruz de ambos vectores sigue siendo un vector. Pero cuando i = j, sigue debido a la identidad del vector:  $a_1 * (a_2 \times a_3) = a_2 * (a_3 \times a_1) = a_3 * (a_1 \times a_2)$ .), donde  $\delta_{ij}$ es el símbolo de la delta de Kronecker:  $\delta_{ij} = 0$ , si  $i \neq j$ , y  $\delta_{ij} = 1$ , si i = j. Ahora, para cualquier vector K puede escribirse como una combinación lineal de  $b_i$ :  $K = K_1b_1 + K_2b_2 + K_3b_3$ ; y si R es un vector de la red cristalina, entonces:  $R = n_1a_1 + n_2a_2 + n_3a_3$ , donde  $n_i$  son números enteros, entonces multiplicamos ambas ecuaciones dando:  $K * R = 2\pi(K_1n_1 + K_2n_2 + K_3n_3)$ .

Para que  $e^{iK*R}$  sea unidad para toda R, K\*R debe ser  $2\pi$  veces un numero entero para cualquier numero  $n_i$ . Por lo tanto K debe tener una condición como vector en la red reciproca que satisfaga aquellos vectores de  $b_i$ . Con esto, la red reciproca es una red de Bravais y  $b_i$  puede tomarse como vectores primitivos. [1,12]

### 1.2.1 Espacio reciproco K:

Los espacios nos muestran las posiciones en que los átomos están distribuidos en la red recíproca. Para poder entender el movimiento de los electrones de conducción es necesario considerar otro tipo de espacio, que en matemáticas se le denomina espacio dual o espacio reciproco, relacionado con el espacio coordenado, este espacio surge de la mecánica cuántica. La relación de la frecuencia  $f = \frac{\omega}{2\pi}$ , la longitud de onda  $\lambda$  y la velocidad  $\vec{v}$  de propagación de la onda es  $\lambda f = \vec{v}$ , para definir mejor el vector asociado a la onda se puede establecer como  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  también conocido como numero de onda circular, y para obtener la frecuencia de onda se sustituye  $\lambda$  en la ecuación de la velocidad de onda, para esto es necesaria despejarla de k esto es  $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ . Sustituyendo en la ecuación de la velocidad da como resultado  $\lambda f = \vec{v} \rightarrow f = \frac{\vec{v}}{\lambda} \rightarrow f = \frac{\vec{v}}{\frac{2\pi}{\lambda}} \rightarrow f = \frac{\vec{v}k}{\frac{2\pi}{\lambda}}$ . Para una onda asociada a electrones de conducción, el momento p = mv de un electrón con una masa  $m_e$  viene siendo por  $\vec{P} = \frac{\hbar}{2\pi}k$ , reduciendo la constante de Planck quedando  $\vec{P} = \hbar k$ . Por ello, la cantidad de movimiento del electrón es proporcional al vector de onda k, con esto se puede definir el espacio reciproco, llamado espacio k, para describir el movimiento de los electrones. Si una celdilla de cristal unidimensional tiene un parámetro de red de a y una longitud de L = 10a, entonces los átomos estarán distribuidos en esa longitud  $x = 0, a, 2a, 3a, \dots, 10a = L$ . Con respecto a la onda k adquirirá los valores  $\frac{2\pi}{L}$ ,  $\frac{4\pi}{L}$ ,  $\frac{6\pi}{L}$ , ...,  $\frac{20\pi}{L} = \frac{2\pi}{a}$ , el menor valor que se le da a k es  $\frac{2\pi}{L}$  y el mayor que se le puede dar es  $\frac{2\pi}{a}$ . La celda unitaria en este espacio de coordenadas unidimensionales tiene una longitud de a, y la celda característica del espacio reciproco, se le conoce como zona de Brillouin, tiene el valor de  $\frac{2\pi}{a}$ . Los sitios de los electrones dentro de la zona de Brillouin se encuentran en los puntos de la red reciproca  $k = \frac{2\pi n}{L}$ . Una red bidimensional con coordenadas x e y, y con parámetros en la red de a y b, el espacio reciproco se comportaría como un espacio bidimensional, con vector de onda  $k_x$  y  $k_y$ . Por coherencia en el caso de esta red bidimensional, la zona de Brillouin de este espacio reciproco tiene un largo de  $\frac{2\pi}{a}$  y un ancho de  $\frac{2\pi}{b}$  (Fig. 17). En una red tridimensional la onda  $k_x$  es proporcional al momento  $p_x$  del electrón de conducción en dirección de x, y similarmente para la relación entre  $k_y$  y  $p_y$  [13,14].



Figura 17.- Es la representación de una celda unitaria en un espacio bidimensional  $x \in y$  (a) y su correspondiente zona de Brillouin en el espacio reciproco  $k_x$  y  $k_y$  (b), en una red de Bravais rectangular.

# Capítulo 2

### **Materiales bidimensionales**

### 2.1 Materiales bidimensionales Xeno (x= Si, Ge, Sn, B, etc.):

Los materiales bidimensionales son aquellos que al ser muy delgados su altura es atómica siendo no relevante para su estudio solo importando su anchura y longitud. Desde el descubrimiento del grafeno muchos investigadores se quedaron fascinados por sus importantes y maravillosas propiedades dignas de usarse en electrónica. Esto acelero el desarrollo mundial de nanotecnología y aplicaciones en la energía, electrónica y salud. Los materiales bidimensionales son placas de átomos del material que se requiera, para el grafeno son los átomos de carbón, el germaneno de germanio, el boroneno de boro y así sucesivamente. Generalmente estas placas tienen forma de panal (Fig. 18) y con un pandeo (esto no pasa en el grafeno, pero si en el siliceno), este pandeo es provocado por las distancias de átomo a átomo que son grandes resultando que estén algunos átomos arriba y otros abajo [15,16]. La estructura en forma de cierre y el acoplamiento fuerte espín-orbita accede a un nuevo estado cuántico de la materia conocido como aislador topológico. El aislador topológico se basa en pocas palabras a una condición de conducción de electrones por la superficie del material, pero se comporta como un aislante en su volumen, la conducción por superficie en estos exóticos materiales es por el acoplamiento de su espín y su dirección de movimiento, esto permitiendo que los materiales 2D sean muy eficiente para la electrónica y posteriormente a la espíntrónica. [15,16]

Con el descubrimiento del grafeno y sus propiedades únicas, la comunidad científica se ha dado a la tarea de descubrir y crear materiales que puedan competir con él, de esta idea se crearon materiales 2D con elementos del grupo XIV (Si, Ge y Sn). La ventaja que tiene el siliceno y el germaneno en comparación con su hermano el grafeno, es por la competitividad que tienen con las nanotecnologías, esto porque la mayor parte de la electrónica está basada en el silicio y en el germanio, haciendo que se adapte mejor a los requisitos que se piden para la industria de la electrónica.
Table 1   Properties of 2D-Xenes.											
	Free-standing 2D-Xenes (predicted)					Epitaxial 2D-Xenes (Xene-on-substrate)					
	$a_{\chi}$ (Å)	ℓ <sub>x-x</sub> (Å)	δ(Å)	Eg	Ref.	Substrate	Phase	a <sub>x</sub> (Å)	ℓ <sub>x-x</sub> (Å)	δ(Å)	Ref.
Graphene	2.47	1.42	0	~1.0 µeV		Metals		2.47	1.42	0	58
Silicene	3.87	2.28	0.44	1.5-2.0 meV	59	Ag(111)	$3 \times 3/4 \times 4$	11.78	2.34-2.39	0.71-0.79	14-17
							√7 × √7/√13 × 13	10.60	2.31-2.36	0.77-0.79	
							√7 × √7/2√3 × 2√3	10.20	2.28-2.37	1.10	
						lr(111)	$\sqrt{3} \times \sqrt{3}/\sqrt{7} \times \sqrt{7}$	7.20	2.10	0.83	18
						ZrB <sub>2</sub>	√3×√3/2×2	6.72-6.78	2.24-2.26	0.90-1.35	19
						MoS <sub>2</sub>	1×1/1×1	3.17	2.61	1.90	41
Germanene	4.06	2.44	0.69	23.9-30.0 meV	59	Au(111)	√3 × √3/√7 ×√7	7.65	2.55	0.47	22
						Pt(111)	3×3/√19×19	12.0	~2.31	0.60	23
						AI(111)	2×2/3×3	8.50	2.60-2.65	1.23	24
						MoS <sub>2</sub>	1×1/1×1	3.82	2.20	0.86	42
						Hex-AIN	3×3/4×4	12.31	2.37	0.70	26
Stanene	4.68	2.83	0.85	0.1eV	12	Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub>	1×1/1×1	4.38	2.80	1.20	27

#### Tabla 1.- Propiedades de los materiales 2D-Xenes. Fuente [15].

Computed structural parameters of free-standing 2D-Xenes, using first-principles calculations based on density functional theory (left-hand side). Experimentally observed or calculated structural parameters of epitaxial Xenes-on-substrates (right-hand side).  $\alpha_c \, \xi_{xx}$  and  $\delta$  are the cell lattice constant, interatomic distance and buckling parameter in 2D-Xenes.  $E_{\alpha}$  is the SOC-induced bandgap. The right-hand side includes a list of substrates that have been found to accommodate specific 2D-Xene lattices and their atomic reconstructions (commonly denoted as 'phases') on the substrates' surface. Graphene parameters are reported for comparison. Note that graphene has nominally zero atomic buckling in the absence of rippling.

En la tabla 1 se puede observar las propiedades de los materiales bidimensionales,  $a_x$ ,  $\iota_{x-x}$ ,  $\delta$  representan la red celular, la distancia interatómica y el parámetro de pandeo en 2D-Xenes respectivamente y  $E_g$  es la energía de la banda prohibida (lado izquierdo de la tabla). Epitaxia es el crecimiento ordenado de una capa mono cristalina que mantiene una relación definida con respecto a un substrato cristalino inferior (lado derecho de la tabla). En la siguiente línea del tiempo se puede observar el descubrimiento de los materiales bidimensionales más importantes.



Con el descubrimiento de estos materiales se podrá descubrir nuevas ramas de la física y el amplio desarrollo de la electrónica, espíntrónica y demás áreas en que se necesiten estos materiales, para el conocimiento humano y tecnológico.

Germaneno: En septiembre de 2014, G. Le Lay y sus colaboradores informaron de la creación de un material de un grosor de un átomo, en una capa multi-pelicula 2D por el método de epitaxia de haz molecular, en una superficie de oro que forma una estructura cristalina con índices de Miller (tres números que permiten identificar unívocamente un sistema de planos cristalográficos), esto revelo una estructura hexagonal tipo panal de abeja casi plana [17]. La técnica que se utiliza para hacer el germaneno sobre un sustrato de oro es usando bajas temperaturas aproximadamente a 250 °C (epitaxial de haces moleculares). Esto llevo a obtener una estructura cristalina con orientación adecuada y propiedades eléctricas apropiadas para usarse en la electrónica [18]. Las propiedades electrónicas y ópticas del germaneno se determinaron a partir de los cálculos de método ab inito, esto es la simulación computacional basado en la química cuántica y física cuántica. Estos cálculos predijeron que al aplicar un campo eléctrico vertical abre un espacio de banda en el germaneno semimetálico en una capa, este espacio aumenta o disminuye dependiendo de la intensidad del campo eléctrico, esto indica que usando un transistor de efecto campo de germanio (siliceno) de doble compuerta aplicado a un campo eléctrico vertical abre un espacio de transporte. Esto indica que el siliceno de capa única y el germaneno polarizado pueden funcionar en temperatura ambiente como transistor de efecto campo [19]. Las propiedades electrónicas únicas de estos materiales son asombrosas y únicas que ponen a prueba a los electrones, estas propiedades también son semejantes a las que comparte con sus hermanos bidimensionales como el grafeno, estaneno, boroneno entre otros.

**Estaneno**: Tras las investigaciones y el descubrimiento del siliceno, el germaneno y el grafeno el interés científico de descubrir más materiales 2D los llevo a experimentar con el estaño llevando a descubrir otro material, el estaneno. El estaneno tiene dos alótropos, el  $\alpha$ -estaneno y  $\beta$ -estaneno, el primero es tipo diamante, con base de dos átomos en una red cubica y el segundo es una base de átomo en una red tetragonal.  $\beta$ -estaneno tiene un problema ante bajas temperaturas, esto es que bajo 13.1°C sufre una transformación al  $\alpha$ -estaneno [20]. Este material junto al germaneno son muy similares y sirven para la electrónica más precisamente para usarse en transistores.

**Fosforeno (fósforo negro):** Este material se ha estudiado durante varios años, pero tomo fuerzas en 2014 esto por sus impresionantes necesidades que le da a la nano-electrónica y optoelectrónica. Por su estructura atómica hace que sus propiedades térmicas y mecánicas se tenga más interés en investigar más de este material, sus propiedades cambian cada vez que la placa se hace más delgada llegando a los nanómetros. El fosforeno se sintetizó en 2014 aplicando una alta presión al fósforo blanco (alótropo del Fósforo) [21]. El 2014 fue maravilloso para el fosforeno, ya que ese año se publicaron artículos relacionados a este material [22], [23]. El fosforeno se obtuvo utilizando un método parecido para descubrir el grafeno por medio del grafito, esto es la exfoliación mecánica en una cinta escocesa. Este material juntos con sus hermanos 2D han atraído mucho el interés de la comunidad científica por sus prometedores avances tecnológicos para el futuro de la electrónica en general, y se espera que se sigan descubriendo más propiedades y aplicaciones.

#### 2.1 Grafeno:

El grafeno [24] es un alótropo del carbón (más alótropos del carbón son el diamante y grafito), de hecho, se puede pensar que el grafito son placas de grafeno encimadas unidas por las fuerzas de Van der Waals. En 1947 el físico canadiense Philip Wallace [25] propuso teóricamente el caso límite de la estructura conformada de grafito, su propósito era examinar y comprender las propiedades electrónicas del grafito en 3D. En 1984 el físico Gordon W. Semenoff [26] teorizó la gran conductividad que tendría el grafeno al ser un material bidimensional, esto fue colocando el grafeno en un campo magnético. En 1987 se acuña el nombre de grafeno por físico S. Mouras. En 2004 Konstantin Novoselov y Andre Geim logran aislar por primera vez al grafeno, posteriormente en 2010 ganan el premio Nobel de física por sus revolucionarios descubrimientos acerca de este material. El método que utilizaron para extraer el grafeno del grafito es por exfoliación mecánica o método de la cinta adhesiva (escocesa). Este consiste en raspar repetidamente el grafito con un tapete de celofán, luego se presiona la cinta sobre un sustrato de Si/SiO<sub>2</sub> (silicio-dióxido de silicio) para depositar las placas de grafeno. El grafeno es un nano-material de interés científico por sus diferentes comportamientos físicos, se

le denomina nano-material por ser de un tamaño en escala nanométrica. El grafeno está compuesto de átomos de Carbón puro, estos átomos se pueden ver también en el grafito o diamante; el grafeno tiene el espesor de un átomo (monocapa), por lo tanto, su tamaño es muy fino y esto lo hace ver que posee solo dos dimensiones largo y ancho, puesto que la tercera, la altura, es muy pequeña lo que hace ver que no exista. De ahí es que se le considere material bidimensional como lo es el siliceno (que se hablara más adelante). Si se observa detalladamente, se ve cómo estos átomos de carbono permanecen ordenados en forma de hexágonos planos fuertemente enlazados y puestos en una superficie uniforme de ligera ondulación, esta forma hace recordar las celdas que tiene un panal de abejas (Fig. 18).



Figura 18.- Comparación del grafeno con las celdas de un panal de abejas.

## 2.1.1. Propiedades del grafeno:

El grafeno es un material con propiedades asombrosas. Se ha convertido en el material por excelencia del futuro, esto ayudara en la revolución tecnología como nunca se había visto. Algunas propiedades más destacadas del grafeno son:

• Conductividad térmica: La conductividad térmica en el grafeno es de 5000  $Wm^{-1}K^{-1}$ , mientras que en el cobre es de 400  $Wm^{-1}K^{-1}$  a temperatura ambiente • Conductividad eléctrica: El grafeno es un buen conductor como el cobre, su conductividad eléctrica es de  $0.96 \times 10^8 (\Omega m)^{-1}$ , mientras que el cobre es de  $0.60 \times 10^8 (\Omega m)^{-1}$  y el del silicio  $4.5 \times 10^{-4} (\Omega m)^{-1}$ . El grafeno se comporta como un conductor y un superconductor.

- Elasticidad (deformable).
- Dureza (resistencia a ser rayado).

•Resistencia: El grafeno es más resistente que el acero, se comparara a la resistencia del diamante. La resistencia del grafeno es de 42Nm<sup>-1</sup>, si una placa de acero lo reducimos hasta tener el espesor del grafeno su resistencia seria de 0.40 Nm<sup>-1</sup> esto quiere decir que el grafeno es 100 veces más resistente que el acero.

- Flexibilidad
- •Resistencia a la radiación lonizante.
- Bajo efecto Joule (calentamiento al conducir electrones).
- El grafeno consume menos electricidad que el silicio.
- El grafeno es un material transparente.
- Es muy denso, ningún átomo como el Helio puede pasar sobre él.

## 2.1.2. Aplicaciones del grafeno:

Las propiedades del grafeno lo hacen indicado para desarrollar nuevas tecnologías electrónicas como en la fabricación de circuitos integrados. Con sus propiedades eléctricas y térmicas hacen posible la fabricación de procesadores más rápidos y resistentes que los que actualmente hay. Se ha puesto ya en marcha la fabricación de transistores de efecto de campo construidos con grafeno, estos transistores aprovechan la alta movilidad de portadores con bajo nivel de ruido que presenta el grafeno.

Las aplicaciones que hay y se puede dar al grafeno son las siguientes:

Destilación de etanol a temperatura ambiente para combustible y consumo

humano.

- Detectores ultrasensibles de gas.
- Moduladores ópticos.
- Transistores de grafeno.
- Circuitos integrados más rápidos y eficientes.
- Electrodos transparentes.
- Dispositivos electrónicos.
- · Celdas solares.
- Desalinización.
- Aplicaciones antibacterianas.

El gran problema de la fabricación del material es que es muy costoso la exfoliación del grafito transfiriendo hojas de grafeno desde el grafito y por crecimiento epitaxial. Existen argumentos que aseguran que el grafeno no sustituirá al silicio, ya que el grafeno es un gran conductor eléctrico y que su resistencia es mínima (cercana a

0) y esto hace que el grafeno no interrumpa el flujo de electrones pudiendo dañar componentes eléctricos importante, como al contrario del silicio que este por ser un semiconductor se pueda comportar como un aislante (con una resistencia considerable) o como conductor. El físico holandés Walt De Heer [27] experto en el campo de la tecnología apoya el uso del grafeno como un nuevo material que podrá hacer cosas que el silicio no puede, pero asegura que este no podría ser sustituido por el grafeno.

#### 2.2. Siliceno:

Desde el descubrimiento del grafeno, toda la comunidad científica que se dedica a la física de estado sólido ha decidido buscar más materiales bidimensionales parecidos al grafeno, y afortunadamente los hay (ya escritos en páginas anteriores). dejando más preguntas que respuestas, del porque son tan comunes. En 1994 los físicos K. Takeda y K. Shiraishi [28] estudiaron el comportamiento estructural hexagonal bidimensional con base atómica del silicio, el silicio se comporta adecuadamente bien en esta forma solo que no tiene una geometría lineal como lo tiene el grafeno. En 2007, los físicos Lok Lew Yan Voon y Gian Guzmán-Verri [29] de la Wright State University de Dayton, Ohio, nombraron al material bidimensional compuesto de silicio como siliceno. La idea de realizar un nuevo material competidor del grafeno fue para revolucionar los componentes electrónicos que utilizan el silicio, pero el problema que se tiene es que el siliceno no es similar al grafeno simétricamente ya que por su tipo de enlace no le permite tener una capa lineal como lo tiene el grafeno, esto hace que la capa de Siliceno tenga forma de zigzag, o sea un átomo de silicio abajo y otro arriba, pero en su forma hexagonal es muy parecido, en la figura 19 se puede percibir el zigzag de los átomos de silicio.



Figura 19.- Diferencias geométricas del grafeno y siliceno, esto por el comportamiento natural de sus átomos que componen cada material. Fuente [33]

En 2009 el físico Seymur Cahangirov y sus colaboradores [30], mostraron que el siliceno puede presentar tres tipos de formas posibles para una estructura bidimensional, el cual se percibe como una red plana, no plana con una baja deformación (LB, Low Buckeld) y no plana con una alta deformación (HB, High Buckeld), con separaciones verticales de 0Å, 0.44Å y 2.13Å entre átomos de silicio contiguos. El siliceno por tener átomos de silicio lo hace un excelente semiconductor para la elaboración de nano-electrónica, esto no quiere decir que en un futuro próximo se vean celulares o televisiones con esta tecnología, ya que aún siguen experimentando con él para saber cuáles son sus límites térmicos, eléctricos, químicos, magnéticos y mecánicos. Mediante espectroscopia se ha demostrado que el siliceno posee una estructura de bandas electrónicas similares a las que, como el grafeno, permiten a los electrones moverse velozmente por su interior. Si se fabrica y comercializa el siliceno en cantidades razonables y aceptables a un bajo costo, seguramente reemplazará al grafeno en buena parte de sus aplicaciones electrónicas. Las investigaciones teóricas acerca del siliceno se puede mencionar en el estudio de las propiedades estructurales de nanocintas de silicio, las cuales son muy estables a temperatura ambiente, y el estudio de nanotubos de silicio, se ha informado la formación de siliceno en varios sustratos metálicos y sintetizarlo.



Figura 20.- En la variación de energía total muestra que el siliceno (HB) no es muy estable, mientras que (LB) es muy estable, esta diferencia en su estabilidad es a causa de la dispersión de los fonones en las redes respectivamente. El grafeno se puede representar como una figura con geometría plana con enlazamiento tipo  $\sigma$  y  $\pi$  en los orbitales atómicos. Fuente [33].

La primera sintetización al siliceno por métodos químicos basados en soluciones fue hecha por Hideyuki Nakano y sus colaboradores del instituto de investigación del grupo Toyota [31]. El experimento consistió en la exfoliación de un compuesto cristalino de disiliciuro de calcio (CaSi<sub>2</sub>), teniendo un apilamiento alternado de átomos de calcio y silicio con estructura hexagonal. Este método dio como resultado que las nano-estructuras se encontraran químicamente entrelazadas con oxígeno y también dopadas con magnesio, esto por el método utilizado. Posteriormente otros investigadores utilizaron otros métodos para reducir el oxígeno en las placas de siliceno, esto fue exfoliando compuestos diferentes como lo es el polisilano. Un grupo de investigación liderado por Chun-Liang Lin [32] han tenido éxito en resolver el problema de crecimiento de siliceno mediante el uso de depósitos de silicio por métodos físicos con la selección de un sustrato metálico, en este caso la de plata. En el experimento para la fabricación del siliceno se utilizó una cámara de ultra alto vacío mediante el empleo de la técnica de dispositivo de vapores por medios físicos como la sublimación del silicio a altas temperaturas. Esta investigación es muy importante para el entendimiento del crecimiento del siliceno, ya que al contrario con el grafeno que se puede formar monocapas independientes, el siliceno necesita un sustrato metálico (plata) para un crecimiento uniforme. El siliceno llegó para quedarse, pero no le será fácil pelear ante otros materiales bidimensionales, ya que cada uno posee propiedades únicas que los hacen dignos de crear nuevas tecnologías en la electrónica, pero en nuestro tema de tesis el siliceno es el material que se utilizara para el análisis de la espíntrónica con la ayuda del nano-dispositivo basado en dicho material. [33]

#### 2.2.1 Propiedades del siliceno:

Las propiedades que se tienen y teorizan son similares a las que se tiene del grafeno, esto es una alta conductancia eléctrica y térmica, dureza y entre otras propiedades que aún se investigan y experimentan con el material. Al ser un material experimental a un no se sabe cuáles son las capacidades que se tiene como lo es el grafeno, ya que no se le ha dado tanta importancia como al grafeno, pero por sus grandes similitudes se piensa que tiene varias propiedades que se podría aprovechar para la industria de la electrónica. Las propiedades estructurales y termodinámicas del siliceno han comenzado a estudiarse, mostrando que su estructura es muy estable a altas temperaturas. La conductancia eléctrica es la propiedad más importante, ya que al tener átomos de silicio lo hace un excelente semiconductor, y esto podría ayudar en la revolución electrónica para crear componentes de este material bidimensional que promete ser muy importante para el futuro de las tecnologías electrónicas, también la prioridad es saber su conducción térmica que se tiene al excitar el siliceno con una diferencia de potencial, esto servirá para saber cuál es el límite al que se tiene que alimentar para no saturar de energía a los electrones y dañe algún conjunto de elementos electrónicos.

#### 2.2.2 Aplicaciones del Siliceno:

En 2014, científicos e investigadores de la facultad de Ingeniería Cockrell de Austin, de la Universidad de Texas (E.U.A.), fue creado el primer transistor hecho de siliceno. La investigación promete que se puedan construir procesadores de computadora y otros dispositivos electrónicos, muchos más pequeños, eficientes y rápidos. El siliceno tiene excelentes propiedades eléctricas, pero es difícil producirlo y trabajar con él. El Dr. Deji Akinwande [34], profesor de Ingeniería Eléctrica y Computación de la Universidad de Texas, con ayuda de investigadores, demostraron que el siliceno se podría aplicar en la tecnología de los transistores, esto porque es un derivado del silicio, estos son utilizados para amplificar y conmutar señales electrónicas y corriente eléctrica. Los dispositivos desarrollados por Akinwande se basan en el siliceno, la más esperada de las revoluciones de la tecnología en el campo de los materiales bidimensionales, esto ayudara en crear chips más rápidos y eficientes, con un mayor almacenamiento de datos de lo que se tiene en estos días.

Un problema que se tiene de estos transistores experimentales es que no son muy buenos en su funcionamiento al aire libre, esto fue un gran problema para Akinwande y su colega el Dr. Alessandro Molle del Instituto de Microelectrónica y Microsistemas de Agrate Brianza en Italia. En una cámara de vacío se colocó una placa cristalina de plata, también se agregó vapor caliente de silicio para que este se condensara en la plata. Sobre la placa de plata se colocó el siliceno y debajo de este se añadió una delgada capa de óxido de aluminio (Alúmina,Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>). Estas capas servirán de protección al siliceno que se encuentra en medio (encapsulado), después de formar esta estructura se dio la vuelta dejando como base el Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y la placa de plata hacia arriba. Una vez que se tuvo esta posición se le coloco debajo un sustrato de dióxido de silicio (SiO<sub>2</sub>) de 90 nm de espesor en  $P^{++}Si$ . La parte superior que es la capa de plata se cortó en dos partes, esto para que sirvieran como dos electrodos, en la figura 21 se puede observar los pasos que se tuvieron y el resultado, esto es la formación del transistor a base de siliceno.

El uso del grafeno en transistores no está bueno como se tenía en mente, esto es, por ejemplo, los transistores no se pueden apagar por completo, lo cual hace que no tenga la función de encendido-apagado, característica muy importante con la que cuentan los transistores modernos, sino que también se ha teorizado que esta función lo tendrán los transistores de siliceno, esto lo hace como el favorito ante el grafeno. El estado encendido y el estado apagado en el siliceno se da por la forma en que están colocados los átomos de silicio, más ondulada (Fig. 19) que la que cuenta el grafeno (forma más lineal), esta propiedad en el siliceno permite a los



Figura 21.- En esta imagen se ilustra el procedimiento que se tuvo en la realización del transistor de siliceno por parte del equipo del Dr. Akinwande y el Dr. Molle. Esto es un experimento con el cual se decidió que es lo más viable en la realización de estos tipos de transistores, este método puede cambiar conforme se avanza en la experimentación con el siliceno. Fuente [34].

átomos de silicio encontrarse a diferentes alturas. Con la variación en la posición de los átomos, los electrones pueden tener diferentes energías permitiendo con ello los estados encendido y apagado al aplicarse los voltajes eléctricos adecuados. En el grafeno con un voltaje mínimo los electrones pueden desplazarse, esto por estar a una energía mínimamente similares.

#### 2.3 Diferencia entre el siliceno y el grafeno:

La diferencia que existe en estos materiales bidimensionales es en la forma en que su estructura está compuesta, esto se centra en la forma en que el carbono y el silicio forman sus enlaces que se extienden en un plano. El carbono crea sus enlaces naturalmente sin un proceso experimental, el silicio no los crea, creando en si enlaces triples tetraédricos. Este tipo de enlaces provoca que los átomos de silicio lleguen a dar una forma arrugada, esto hace que los átomos no se encuentren en el mismo plano dando origen a un zigzag, en la figura 19 se puede apreciar lo que se está describiendo; al tener un mayor tamaño el átomo de silicio da lugar a tener enlaces más largos y más débiles que los que puede tener el carbono. Esto hace al grafeno más fuerte y resistente, como también más "fácil" de hacer y de reproducir naturalmente, en cambio el siliceno al tener problemas en sus enlaces lo hacen difícil de producir, este solo se puede realizar en planos que lo hagan estabilizarse.

# <u>Capítulo 3</u>

## Magnetorresistencia

### 3.1 ¿Qué es la Magnetorresistencia?:

La magnetorresistencia es la propiedad que tienen los materiales para variar o cambiar su resistencia por la excitación de un campo magnético. Este fenómeno tan inusual fue descubierto en 1857 por el físico británico William Thomson, mejor conocido como Lord Kelvin. El artículo [35] publicado por el señor Kelvin demuestra que la resistencia aumenta cuando un material es puesto en paralelo con respecto a las líneas magnéticas provocadas por un campo magnético externo, pero, sin embargo, la resistencia se puede disminuir si el material se le sitúa perpendicularmente en las líneas magnéticas. A este descubrimiento le fue dado el nombre de Magnetorresistencia, este fue solo usando materiales no magnéticos, después de varios años se descubrirían diferentes tipos de magnetorresistencia, estas se pueden ver en la tabla 3.

Magnetorresistencia	Material
MR Clásica (CMR)	Metales no magnéticos
MR Anisótropa (AMR)	Ferromagnético
MR Gigante (GMR)	Ferromagnéticos Multicapa
MR Túnel (TMR)	Ferromagnéticos Multicapa
MR Colosal (CMR)	Óxidos de Perovskita de Manganeso

Tabla 3.- Tipos de magnetorresistencia descubiertas hasta ahora:

En un material la diferencia de potencial dirige a los electrones en una sola dirección, estos pueden ser detenidos o desviados por las impurezas que se tiene en el material, a mayor oposición en el avance de electrones la resistencia será mayor en el material. En un material magnético la resistencia no es provocada por completo por la resistencia del material, esto es según sea la orientación del campo magnético en el material y también la orientación del espín del electrón. Esta resistencia provocada por el campo magnético y el espín del electrón. La definición de la magnitud de la magnetorresistencia es:  $MR = \frac{R(H) - R(0)}{R(0)} \times 100$ . Donde R(0) es

la resistencia natural del material sin ser excitado por un campo magnético externo y R(H) es la resistencia que presenta el material al exponerse a un campo magnético externo.

#### 3.2 Magnetorresistencia Clásica, CMR:

Este fenómeno se observa cuando a un metal no magnético se le presenta un campo magnético externo, y su resistencia eléctrica aumenta o disminuye. Si el campo magnético externo es perpendicular a la corriente que pasa sobre ese material, genera una fuerza a las cargas llamada fuerza de Lorentz:  $\vec{F} = \vec{F}_{elec.} + \vec{F}_{mag.} \rightarrow = q\vec{E} + q\vec{v} \times \vec{B} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}).$  (20)

Siendo q la carga, E el campo eléctrico, v la velocidad de la partícula y B el campo magnético. Esta fuerza actúa en las partículas desviándolas de su trayectoria. Si el campo magnético es muy débil la partícula no se desviará tanto de su camino habiendo una resistencia baja, pero por el contrario si se aumenta el campo la partícula se desviará dando una resistencia alta. Pero si el campo magnético es nulo la partícula no se desviará teniendo una resistencia cercana al cero. La desviación de las cargas también dependerá del espín, esto por la atracción o repulsión de los campos magnéticos de las partículas y la posición de las líneas de campo del campo magnético externo. [36]



Figura 22.- Desviación de las cargas provocado por el campo magnético perpendicular a la corriente, las partículas se orientarán o desviarán (scattering) hacia la polaridad del campo dependiendo de su espín o carga. Con esto se ejercerá una fuerza, desplazándolos de su trayectoria original.

#### 3.3 Magnetorresistencia Anisótropa, AMR:

La AMR es el resultado de la interacción espín-orbita, cuando un campo magnético externo orienta el espín electrónico. La órbita también se alinea junto con el espín, con un campo magnético se puede orientar el momento magnético orbital y el espín del electrón, esto por su acoplamiento, este fenómeno se da mejor en materiales ferromagnéticos. Cuando se le aplica un voltaje al material ferromagnético los electrones de conducción sufren dispersión en el material por fenómenos físicos, las orbitas sirven como centro de dispersión para los electrones [36]. Cuando la sección de las orbitas donde se dispersan los electrones es mayor, la resistencia aumentara. La sección se puede variar orientando las orbitas con respecto a la corriente eléctrica aplicada, esto aplicando un campo magnético externo, de tal forma que, variando el ángulo con respecto a la corriente y el campo magnético, servirá para controlar la dispersión de los electrones, lo que provoca que la resistencia del material cambie. La resistencia en la magnetorresistencia anisótropa dependerá ampliamente del ángulo formado de la corriente y el campo magnético, esto gracias a la interacción espín-orbita.

Cuando se aplica una corriente eléctrica y un campo magnético a un material ferromagnético, y estos están en paralelo, la resistencia aumenta. Esto pasa porque los electrones de conducción se dispersan en mayores áreas en todos los orbitales, provocando un aumento en la resistencia. Esta resistencia elevada se puede reducir aplicando perpendicularmente la corriente y el campo magnético, esto ayudara a que los electrones de conducción no se dispersen en áreas mayores en las orbitas, siendo que la resistencia disminuya por la baja colisión en los cristales [36]. En 1991 la compañía IBM implementaría este fenómeno físico en las cabezas lectoras. Las cabezas lectoras hechas con AMR eran más sensibles que las inductivas, esto permitía un mayor almacenaje de datos en los discos duros.

#### 3.3 Magnetorresistencia Gigante, GMR:

Este fenómeno físico fue descubierto por el físico alemán Peter Grünberg [37] y el físico francés Albert Fert [38], dándoles el máximo galardón que se puede dar a los físicos, en 2007 recibieron el premio Nobel [39]. Este descubrimiento abrió una nueva rama a la electrónica la cual fue llamada espíntrónica. Básicamente, la estructura con que se puede medir y observar la GMR está compuesto por una placa de un material no magnético y a su lado se colocan dos placas de materiales ferromagnéticos dando una apariencia de sándwich. Se puede imaginar un flujo de electrones pasando por la estructura cuando los materiales ferromagnéticos están magnetizados en un solo sentido, esto es provocado por un campo magnético externo del material. Cuando esto sucede los electrones up pasaran fácilmente la estructura esto porque el campo magnético hace que los electrones con espín Up puedan transitar libremente, mientras que los electrones con espín Down son fuertemente dispersados, esto quiere decir que los espines Down tendrán una fuerte resistencia al pasar por esta estructura en comparación de los que tendrán los espines Up (Fig. 23 a). Si la orientación magnética de las dos placas ferromagnéticas es opuesta, el espín Up como el espín Down sentirán una alta resistencia cuando circulen en la estructura ya que serán antiparalelo a las orientaciones magnéticas en las placas y esto hará que sean fuertemente dispersados, en la figura 23 b) se puede ver como es la trayectoria que tendrían los electrones con ambos espines.



Figura 23.- La orientación magnética de los materiales ferromagnéticos son iguales, esto hace que la resistencia sea mayor para los electrones con espín Down a), y si la orientación magnética de los materiales ferromagnéticos es diferentes, la resistencia será mayor para ambos electrones con espín Up y Down b).

Si la segunda placa ferromagnética se deja magnetizada en una sola posición y la primera cambiara sus polos (norte y sur) y que se influenciara de los campos magnéticos externos, la estructura se puede utilizar como una cabeza lectora de discos duros. La magnetización de las dos placas de la cabeza lectora pueda ser paralela o anti-paralela. Esto provoca que la corriente varié en la entrada de la cabeza lectora, tomando como uno (1) una corriente intensa y un cero (0) una corriente débil. La fabricación de esta estructura ideada por Fert y Grünberg es muy laboriosa para fabricar industrialmente, estos modelos sirven más para la investigación que para la producción en masa, esto por su dificultad para realizarse y sus elevados costos. El físico experimental y miembro de la compañía IBM Stuart Parkin [40], ideo una forma de realizar un componente más simple para realizar la GMR con un método llamado sputtering. El método de sputtering o en español traducido como pulverización catódica [41], se basa en la vaporización de los átomos de un material solido denominado como blanco, este es bombardeado por iones energéticos. Este método sirve para crear películas delgadas sobre materiales. En la actualidad el efecto GMR ya no depende de la formación de placas perfectas, esto significa que se puede fabricar a gran escala industrial. Esta revolucionaria tecnología hizo más sensible la GMR para los discos duro que poco después en 1997 fuera producido el primer lector GMR.

La GMR más que revolucionar lectura en discos duros, dio un aplico camino para los nuevos dispositivos electrónicos que con la ayuda del spin de los electrones hacer más eficaces estos dispositivos y ya no utilizar solo la carga eléctrica como en los dispositivos tradicionales. Un problema que se tiene es que las placas de la estructura no deben ser demasiado gruesas ya que en el momento de pasar por el material no magnético que comúnmente es un material aislante los electrones no podrían atravesar este material y también el espín del electrón cambiaria drásticamente, y esto no se podría aprovechar para el propósito que se le tiene. Las placas deben ser delgadas para aprovechar ampliamente el spin, como se ha dicho el material no magnético es un aislante no metálico y este es un pésimo conductor de electrones, pero si se hace tan delgada se produce un fenómeno cuántico muy peculiar y este es el efecto túnel (tunneling), posteriormente se descubrió otro tipo de magnetorresistencia llamada magnetorresistencia de efecto túnel o TMR.

#### 3.4 Magnetorresistencia túnel, TMR:

Cuando las capas magnéticas y no magnéticas son delgadas los electrones tienden a pasar por la parte no magnética (aislante) pareciendo que en ella hay un túnel, y el cambio de resistencia se comporta igual como las demás magnetorresistencias esto es dependiendo de la orientación magnética de la estructura que detecta este fenómeno y del espín del electrón. En 1971 este fenómeno fue detectado por Tedrow y Meservey [42,43], cuando midieron una corriente de tunelaje en estructuras tipo sándwich con electrodos de aluminio superconductores y Níquel. En 1975 fue observado por vez primera este fenómeno por Julliére [44], y desarrollo una teoría para la TMR. Stuart Parkin desarrollo una nueva memoria magnética [45], el funcionamiento de la Memoria magnetorresistiva de acceso aleatorio no volátil (MRAM por sus siglas en inglés) funciona con el principio de la TMR. La MRAM almacena los datos por medio de elementos magnéticos, esto en comparación de una RAM normal que almacena datos en las cargas o corrientes eléctricas. La MRAM está formado por dos discos ferromagnéticos, lo cual cada uno puede mantener un campo magnético, estos están separados por un aislante fino entre ellos lo cual un disco ferromagnético queda con una polaridad propuesta mientras que el otro disco variara para acoplarse al campo magnético externo.

La lectura de datos se basa en el cambio de resistencia en el dispositivo, el efecto túnel provoca el cambio de resistencia según el cambio de orientación en los discos. Cuando los discos tienen la misma polaridad magnética se representa como un 0 (resistencia mínima) y cuando ambos tienen polaridad distinta se toma como un 1 (resistencia alta).

#### 3.4.1 Efecto túnel:

El efecto túnel [46] es un fenómeno cuántico que afecta a las partículas, en este caso se hablara del electrón. En mecánica clásica este efecto no se aplica a los sistemas con masas superiores a las de las partículas, esto es porque no se comporta como onda sino solo como una partícula sólida. El electrón al comportarse

como una onda y una partícula tiene una probabilidad de atravesar una barrera de potencial (en este caso un aislante), esto si se viera macroscópicamente el electrón rebotaría como una pelota se tratará.



Figura 24.- Objetos de masa superior a las partículas tienden a gastar energía necesaria para pasar una barrera energética según sea el tipo de fenómeno que se requiera sobre pasar, ya sea una pendiente, una fuerza contraria al movimiento o alguna otra energía que contrarreste la que el objeto se tenga como una barrera. En partículas microscópicas como los electrones esto no afecta su movimiento pudiendo pasar la barrera energética por el efecto túnel, atravesar la barrera.

#### 3.5 Magnetorresistencia Colosal, CMR:

En 1971, Searle y Wang [47] descubrieron altos valores de magnetorresistencia en manganitas ferromagnéticas. Años después, en los 90's [48] se determinó que las manganitas poseen un valor de magnetorresistencia muy elevados nunca antes visto en otros materiales. Para diferenciar a las demás magnetorresistencias se le dio el nombre de Magnetorresistencia Colosal (CMR), esto por su alto porcentaje de MR. El uso de esta MR es muy complicado en aplicaciones en dispositivos electrónicos, esto es porque para tener el alto valor de la MR se tiene que tener un alto campo magnético. El tipo de manganeso que se utiliza para esta MR es la que se basa en la estructura oxido de Perovskita [48]. La Perovskita es un mineral en el interés de la física de los materiales por tener propiedades de superconductor, magnetorresistencia y entre otras más propiedades dieléctricas que hacen desplazar al silicio, teniendo una gran importancia en la nano-electrónica. La CMR es muy importante para la investigación y experimentación básica, esto podría revolucionar en un futuro la electrónica, esto hasta poder controlar su MR con campos magnéticos no tan elevados

## Capítulo 4

# Nano-dispositivo basado en el Siliceno y el transporte de electrones. [49]

#### 4.1 Nano-dispositivo de Siliceno:

El siliceno es un material ideal para manipular el transporte de espín debido a su acoplamiento intrínseco de espín-orbita, la comunidad científica se ha comprometido a mejorar y controlar las propiedades del transporte de espín, especialmente la magnetorresistencia (MR) y la TMR [50,51,52]. Estas propiedades son muy importantes para los sensores, la información, la medicina y la informática [53,54]. Por ejemplo, Xu et al. [55] han predicho una MR hasta 1960% en nano cintas de siliceno en zigzag (ZSiNR) bajo voltajes de polarización finitos. Además, Kang [56] y sus colaboradores han realizado un estudio de las propiedades de transporte en ZSiNRs utilizando los cálculos de los primeros principios. Informan que el efecto de magnetorresistencia con N-ésimos números de ZSiNRs puede alcanzar el 1 000 000%. Propusieron que esta propiedad interesante podría ser la base para diseñar puertas lógicas, como NOT, AND y OR en dispositivos basados en ZSiNRs. El mismo sistema ha sido analizado por Zhang et al. [57] bajo la hidrogenación de bordes asimétricos mediante el método de función de Greens sin equilibrio y la teoría funcional de densidad polarizada por espín. Descubrieron que la magnetorresistencia gigante resultante puede alcanzar el 100 000 000%. Sus hallazgos podrían ser útiles en el desarrollo de filtros de espín a base de siliceno de alto rendimiento, rectificadores de espín y dispositivos lógicos.

Recientemente, Wang et al. [51] sugirió el campo magnético como un nuevo camino para manipular el valle y el transporte de espín en el siliceno. También demostraron que la conductancia y la magnetorresistencia túnel, en una estructura de siliceno con barreras ferromagnéticas (FM), pueden controlarse mediante efectos de campo magnético externos. En concreto, se centran en el efecto de la magnetización asimétrica en la polarización valle/espín y TMR. En el mismo sentido, se ha informado que en dos barreras ferromagnéticas en la parte superior de la monocapa

de siliceno [50], el campo magnético afecta intensamente la transmisión de la configuración anti-ferromagnética (AFM) del dispositivo y amplía la región de transmisión prohibida para el caso ferromagnético. Qiu et al. [58] analizaron el transporte de electrones en la unión de siliceno Ferromagnético/Normal/ Ferromagnético (FNF). Muestran que un giro perfecto y una conductancia polarizada en el valle se pueden lograr ajustando el potencial de barrera. Asimismo, Saxena et al. [59] han investigado la conductancia, valle y polarización de espín y magnetorresistencia túnel en la unión FNF del siliceno. Encontraron que la TMR se puede sintonizar perfectamente a través de los efectos de campo eléctrico, así como una corriente totalmente polarizada de valle y de espín se puede lograr mediante efectos de campo externos.

En la figura 25 se puede visualizar el nano-dispositivo y se describirá el funcionamiento.



Figura 25.- El esquema del nano-dispositivo compuesto de siliceno indica sus diferentes etapas de funcionamiento. Fuente [49].

#### Descripción de la figura 25:

Fig. 25a, representación esquemática de la sección transversal de Ferromagnética/ Normal/Ferromagnética (FNF) unión asimétrica en la superficie de siliceno. El siliceno consiste en una red hexagonal tipo panal de abeja con de átomos de silicio con dos sub redes A (círculos rosados) y B (círculos azules). Una configuración típica en dicho dispositivo consiste en dos barreras ferromagnéticas (rectángulos grises) de anchos específicos depositados en la parte superior de una capa dieléctrica delgada y separados por una distancia L. El ancho de la barrera izquierda es  $d_1$  y el ancho de la derecha es  $d_r$ . Otra diferencia entre las barreras de FM es la alineación de magnetización, la barrera ferromagnética derecha puede tener la magnetización en la misma dirección que la barrera izquierda o contraria a esta. La magnetización de la barrera ferromagnética izquierda es fija. Los alineamientos de magnetización paralelos (P) Fig. 25b y antiparalelo (AP) Fig. 25c, en la unión de siliceno FNF son inducidos por un campo parásito  $\vec{B}_{z}(x)$ .  $\vec{A}_{l}$  y  $\vec{A}_{r}$  son los potenciales vectoriales magnéticos transversales correspondientes (rectángulos grises) para la alineación P y AP. Las líneas discontinuas en Fig. 25b representan los potenciales electrostáticos locales  $U_l$  y  $U_r$  inducidos por el voltaje de la barrera superior. Aquí, nos interesa el control de las propiedades de transporte y, en consecuencia, la mejora de la TMR por efectos asimétricos estructurales. Específicamente, estamos considerando barreras asimétricas, en las cuales el contraste es inducido por los campos magnéticos y eléctricos aplicados, los intervalos de banda y el ancho de las barreras.

La utilidad de este dispositivo será de mucha ayuda y revolucionará la espíntrónica y electrónica en general, dando una brecha hacia la computación cuántica. Para los cálculos de las propiedades de transporte y la TMR se necesitan matemáticas avanzadas que se describirán en el siguiente punto.

#### 4.2 Antecedentes teóricos:

La unión ferromagnética que se está estudiando es la de un nano-dispositivo que consiste básicamente en una lámina de siliceno y dos barreras ferromagnéticas (Fig. 25a). Este dispositivo tiene dos configuraciones ferromagnéticas, paralelo (P) y antiparalelo (AP). Cuando la alineación de la barrera del lado derecho es la misma que la alineación de la barrera del lado izquierdo, la configuración es P (Fig. 25b). En contraste, cuando tienen una alineación diferente, es AP (Fig. 25c). El control de la energía de Fermi de los electrones incidentes se maneja mediante un campo

magnético de tipo delta (coordenada *z*) localizado en los bordes de las barreras ferromagnéticas [50,60] (Fig. 25b). El campo magnético  $\vec{B}_z$ , como se informó en trabajos anteriores [50,60], se describe formalmente por: (21)

$$\vec{B}_{Z}(x) = \gamma_{I}\vec{B}_{I}l_{B_{0}}\left[\delta\left(x+d_{I}+\frac{L}{2}\right)-\delta\left(x+\frac{L}{2}\right)\right] + \gamma_{I}\vec{B}_{I}l_{B_{0}}\left[\delta\left(x-\frac{L}{2}\right)-\delta\left(x-d_{I}-\frac{L}{2}\right)\right],$$

el correspondiente vector magnético potencial *A* está dado por =  $[0, A_y(x), 0]$ , siguiendo el indicador de Landau, con  $A_y(x)$  se deduce de  $A_y(x) = \int_{-\infty}^{X} B_z(x) dx$ como:

$$\vec{A}_{y}(x) = l_{\vec{B}_{0}} \left[ \gamma_{l} \vec{B}_{l} \Theta \left( x + d_{l} + \frac{L}{2} \right) \Theta \left( -\frac{L}{2} - x \right) + \gamma_{r} \vec{B}_{r} \Theta \left( \frac{L}{2} + d_{r} - x \right) \Theta \left( x - \frac{L}{2} \right) \right],$$
(22)

aquí,  $\gamma_l = \pm 1$  representa la magnetización de la banda de FM izquierda ( $FM_l$ ) paralelo (+1) o antiparalelo de (-1) a la coordenada x, de manera similar,  $\gamma_r = \pm 1$ representa la magnetización de la banda de FM derecha ( $FM_r$ ) paralelo (+1) o antiparalelo (-1) a la coordenada x, y  $I_{B_0} = \sqrt{\hbar/eB_0}$  es la longitud magnética, con  $B_0$  un campo magnético de referencia. Otra estrategia flexible para modular el transporte cuántico en siliceno es sintonizar los barrieres electrostáticos ( $EB_s$ ) localmente  $U_l$  y  $U_r$  (Fig. 25 a y b). El perfil de EB se da como:

$$U(x) = U_{l}\Theta\left(x + d_{l} + \frac{L}{2}\right)\Theta\left(-\frac{L}{2} - x\right) + U_{r}\Theta\left(\frac{L}{2} + d_{r} - x\right)\Theta\left(x - \frac{L}{2}\right), \quad (23)$$

donde  $U_l(U_r)$  es la altura de los  $EB_S$  inducidos por  $FM_l(FM_r)$  y  $\Theta(x)$  es la función Heaviside.

A diferencia del grafeno, el siliceno no es coplanar [61] y se caracteriza por una diferencia de potencial en el sitio de la subred, lo que resulta en un espacio de banda local que puede ser manipulado por un campo eléctrico perpendicular. Este intervalo de banda local se considera como [50].

$$\Delta(\mathbf{x}) = \Delta_{\mathrm{I}}\Theta\left(\mathbf{x} + \mathbf{d}_{\mathrm{I}} + \frac{\mathrm{L}}{2}\right)\Theta\left(-\frac{\mathrm{L}}{2} \cdot \mathbf{x}\right) + \Delta_{\mathrm{r}}\Theta\left(\frac{\mathrm{L}}{2} + \mathbf{d}_{\mathrm{r}} \cdot \mathbf{x}\right)\Theta\left(\mathbf{x} - \frac{\mathrm{L}}{2}\right), \quad (24)$$

donde  $\Delta_l$  ( $\Delta_r$ ) es el intervalo de banda local en el dominio ferromagnético  $FM_l(FM_r)$ . Para estudiar las propiedades de transporte de nuestro sistema, es necesario calcular la estructura de la banda. El siliceno bajo la influencia de campos magnéticos y eléctricos externos, así como un intervalo de banda local (efectos de campo ferromagnético) puede ser descrito por el siguiente Hamiltoniano de bajas energías alrededor del punto de Dirac [62].

$$H = v_F (\pi_x \tau_x - \eta \pi_y \tau_y) - (\eta \sigma \Gamma_{SO} - \Delta_z) \tau_z + U I, \quad (25)$$

donde  $v_F$  es la velocidad de Fermi de los portadores de carga en siliceno,  $\pi_{x(y)} = P_{x(y)} + eA_{x(y)}$  es el momento canónico con  $P_{x(y)}$  el impulso electrónico y  $A_{x(y)}$  el potencial del vector magnético,  $\tau = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$  corresponden a la matriz de Pauli de la subred (pseudo-espin), *l* es la unidad de la matriz 2X2,  $\eta = \pm 1$  denota los valles *K* y *K'*, respectivamente, y  $\sigma = \pm 1$  denota los índices de espín.  $\Gamma_{SO}$  especifica el acoplamiento espín-orbita, que en siliceno tiene un gran valor 3.9 meV [63]. Esta es una clara diferencia con respecto al grafeno. Al resolver la ecuación de valores propios para este Hamiltoniano es posible obtener las funciones propias y los valores propios (vectores de onda). Como nuestro sistema está compuesto por diferentes regiones (barreras y regiones semi-infinitas), tendremos funciones de onda y vectores de onda específicos para esas regiones.

En términos genéricos podemos escribir la función de onda como:

$$\psi_j(x,y) = A_j \begin{pmatrix} 1 \\ V_j^+ \end{pmatrix} e^{+ik_{x,j}x + ik_{y,j}y} + \overrightarrow{B}_j \begin{pmatrix} 1 \\ V_j^- \end{pmatrix} e^{-ik_{x,j}x + ik_{y,j}y}, \quad (26)$$

donde

$$k_{xj} = \sqrt{(E - U_j)^2 - (\eta \sigma \Gamma_{SO} - \Delta_{zj})^2 - (k_{yj} + A_j)^2}, \quad (27)$$

у

$$v_j^{\pm} = \frac{E - U_j + (\eta \sigma \Gamma_{SO} - \Delta_j)}{\pm k_{xj} + i\eta (k_{yj} + A_j)}, \quad (28)$$

Para la región entre las barreras y las regiones semi-infinitas a la izquierda y derecha de las barreras  $U_j = \Delta_{zj} = A_j = 0$ . Los coeficientes desconocidos  $\vec{A}_j$  y  $\vec{B}_j$  están interrelacionados por la condición de continuidad en la interfaz a lo largo de la coordenada x:

$$\psi_{j+1}(x_{jj+1,y}) = \psi_j(x_{jj+1,y}), \quad (29)$$

así como por la conservación del componente y del impulso:  $k_{yj} = k_y$ , (30).

La relación entre los coeficientes de la región semi-infinita izquierda ( $A_0$  y  $B_0$ ) y los coeficientes de la región semi-infinita derecha ( $A_N$  y  $A_N$ ) se puede escribir de una forma más compacta a través de la matriz de transferencia, saber que:

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_{N+1} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (31)$$

donde la matriz de transferencia M, dada por:

$$M = D_0^{-1} \left( \prod_{j=1}^N D_j P_j D_j^{-1} \right) D_0, \quad (32)$$

Se define en términos de las matrices dinámicas de  $D_j$  y propagación  $P_j$ :

$$D_j = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ v_j^+ & v_j^- \end{pmatrix}, \quad (33)$$

у

$$P_{j} = \begin{pmatrix} e^{-id_{j}k_{xj}} & 0\\ 0 & e^{+id_{j}k_{xj}} \end{pmatrix}, \quad (34)$$

Aquí j = 1,2,3,...,N. En nuestro caso, N = 3, representa la primera región ferromagnética de la barrera, la región del pozo intermedio y la segunda barrera.  $D_0$  es la matriz dinámica de las regiones izquierda y derecha semi-infinitas, que son las mismas en este modelo. Del mismo modo,  $k_{xj}$  y  $d_j$  son el componente x del vector de onda y el ancho de la región j-ésimo, respectivamente. Conociendo la matriz de transferencia, podemos calcular fácilmente la probabilidad de tunelización de cada canal de dispersión:

$$t_{P/AP}(E, k_{y}, \eta, \sigma) = \left|\frac{A_{N+1}}{A_{0}}\right| = \frac{1}{|M_{11}(\eta, \sigma)|^{2}}, \quad (35)$$

siendo  $M_{11}(\eta, \sigma)$  el primer elemento de la matriz de transferencia  $M(\eta, \sigma)$  para una representación de  $\eta$  y  $\sigma$ . La transmisión cuántica global correspondiente en la lámina de siliceno para una configuración de magnetización específica es:

$$T_{P/AP} = \frac{1}{4} \sum_{\eta=-1}^{1} \sum_{\sigma=-1}^{1} t_{P/AP} (\eta, \sigma), \quad (36)$$

Con la probabilidad de transmisión a mano, la conductancia para un canal de espín particular y la magnetización se pueden obtener a través de la fórmula de Landauer-Büttiker [64]:

$$G_{P/AP}(\vec{\boldsymbol{E}}_{F},\eta,\sigma) = G_{\theta} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} t_{P/AP}(\vec{\boldsymbol{E}}_{F},\theta,\eta,\sigma) \cos(\theta) d\theta, \quad (37)$$

La conductancia global según la alineación es:

$$G_{P/AP}(E_F) = \frac{1}{4} \sum_{\eta=-1}^{1} \sum_{\sigma=-1}^{1} G_{P/AP}\left(\vec{E}_{F,\eta,\sigma}\right), \quad (38)$$

donde  $E_F$  es la energía de Fermi,  $G_0 = e^2 L_y k_F / \pi^2 \hbar$  es el factor de conductancia fundamental, siendo  $L_y$  el ancho del sistema en la coordenada y transversal,  $k_F = \sqrt{\vec{E}_F^2 - \Gamma_{SO}^2}$  es el vector de onda de Fermi y  $\theta$  es el ángulo de los electrones incidentes con respecto a la coordenada x, dada por la relación entre el vector de onda transversal y el vector de onda de Fermi  $k_y = k_F sen(\theta)$ .

Una vez que se calcula la conductancia, se puede obtener TMR para canales de espín y valle específicos a través de la siguiente expresión:

$$TMR(\eta,\sigma) = \frac{G_P(\eta,\sigma) - G_{AP}(\eta,\sigma)}{G_{AP}(\eta,\sigma)}, \quad (39)$$

De forma equivalente, la TMR global viene dada por:

$$TMR = \frac{G_P - G_{AP}}{G_{AP}}, \quad (40)$$



Figura 26.- A) Representación del movimiento del electrón y el hueco, el movimiento del hueco deja un valle, pero al ser en el siliceno y este estar compuesto por dos subredes este movimiento hace que se mueva simultáneamente dejando detrás dos valles *K* y *K*', B) El electrón al ser una carga negativa se moverá contrariamente al campo eléctrico y el hueco en dirección de este. (Fuente: K. F. Mak et al, Science 344, 1489 (2014))

## <u>Capítulo 5</u>

## Resultados numéricos y teóricos

#### 5.1 Resultados:

Las ecuaciones descritas anteriormente para el cálculo de la transmisión, la conductancia y la TMR para los electrones en siliceno ayudaran a simular estos fenómenos, estando el nano-dispositivo en paralelo (Fig. 25b). El nano-dispositivo consiste en un pozo cuántico y barreras ferromagnéticas de anchuras  $d_w$ ,  $d_l$  y  $d_r$ , respetivamente. Las variables que se utilizan para la sustitución de las ecuaciones son el campo magnético  $\vec{B}$ , campo electrostático U y el número de barreras ferromagnéticas N, dejando la anchura del pozo cuántico y la de las barreras constantes. El nano-dispositivo se puede comportar como un sistema asimétrico, esto es cuando la dirección del campo magnético de la barreras de la extrema derecha tiene orientación opuesta de las demás barreras y cuando las direcciones de todas las barreras tienen el mismo sentido. Como se sabe que el siliceno tiene dos valles k y k' cada valle tiene dos canales Up y Down, en total el siliceno tiene 4 canales de conducción:  $K_{up}$ ,  $K_{Down}$ ,  $K'_{Up}$  y  $K'_{Down}$ .



27.- Representación de los nano-dispositivos con sus respectivos números de barreras que se usaron para realizar las simulaciones de transmisión y conductancia.

## $N = 2, \vec{B}_l = \vec{B}_r = 0, U_l = U_r = 0, d_w = d_l = d_r = \frac{L}{2}$ (Sin efecto magnético)

**Transmisión:** El valor que tiene L = 202.7 nm que esto es el ancho de la región del pozo, entonces se tiene el valor del tamaño de las barreras y del pozo de 101.35 nm. En la Fig. 28 se muestra el resultado de la transmisión de la ecuación (36), en este caso para la configuración paralela de los campos magnéticos de las barreras ferromagnéticas (transmisión paralela,  $T_P$ ). En las gráficas de la Fig. 28 corresponde a la de transmisión en función de la energía (meV) y del ángulo que inciden para los componentes de los espines en el valle *K* para los dos canales  $T_{Down}K$  y  $T_{Up}K$ .



Figura 28.- Transmisión paralela ( $T_p$ ) en función de la energía y el ángulo: para el canal  $T_{Up}K$  a) y canal  $T_{Down}K$ .

Como se puede ver en las gráficas de la Fig. 28 se puede observar los diferentes estados de transmisión para los electrones, desde estados de propagación con excelente transmisión (regiones rojas) hasta con casi nula transmisión (regiones azules), dependiendo de la energía y el ángulo de incidencia. También podemos notar que el espín Up y el espín Down los componentes de la transmisión para el mismo valle *K* tiene diferentes características. La grafica de transmisión para el espín Up (Fig. 28a) es casi idéntico a la gráfica de transmisión del espín Down (Fig. 28b), pero con una diferencia de energía, mientras que en la Fig. 28a con energía cercanas a cero se tiene una transmisión mientras que en la Fig. 28b se necesita mayor energía ya que se tiene una franja azul de casi nula transmisión. Esta

similitud se puede entender teniendo en cuenta el componente del vector de onda en la dirección de propagación  $k_{xj}$  de la ecuación (27). A partir de la gráfica (Fig. 29) notamos picos de oscilaciones donde la transmisión es perfecta (*T*=1). En este caso las barreras se comportan como transparentes, estados de propagación, para diferentes energías y ángulos de incidencia esto es debido a las condiciones de resonancias Fabry-Perot, en la región del pozo y de las dos barreras. En la figura 29 se observan dos curvas, la de color negro son los ángulos positivos y el ángulo 0 (0°, 10° y 30°) y la de color rojo que representa ángulos negativos ( $-10^{\circ}$  y  $-30^{\circ}$ ).



Figura 29.- Se tomaron 5 distintos ángulos (0°,  $\pm$ 10° y  $\pm$ 30°) de la transmisión de la Fig. 28 para los dos espines (*Up y Down*), para los cinco ángulos de *T*(*UK*) (Fig. 29a) se observa que se necesita poca energía para tener transmisión pero sin embargo en *T*(*DK*) (Fig. 29b) se necesita tener mayor energía ya que se ve ausencia de transmisión para bajas energías 0 meV.

**Conductancia:** En la Fig. 30, la conductancia para los dos canales de dispersión en función de la energía (eq.38) se puede ver en la gráfica de la Fig. 30, el canal del espín *Up* (línea negra,  $G_U$ ) es mayor al del canal del espín *Down* (línea roja punteada,  $G_D$ ), en otras palabras, el comportamiento de la corriente eléctrica del espín Up en este nano-dispositivo es diferente al del espín Down, se puede entender como dos corrientes diferentes en una sola corriente eléctrica, por lo tanto, tienden a crecer a mayor energía. Las oscilaciones se deben precisamente a las resonancias mostradas en la Fig. 29.



Figura 30.- La conductancia para el espín Up (línea negra) es mayor a la del espín Down (línea roja punteada), pero a mayor energía (>50 meV) las curvas se van encontrado hasta sobreponerse.

# N = 2, $\vec{B}_l = \vec{B}_r = 0$ , $U_l = U_r = 5$ , $d_w = d_l = d_r = \frac{L}{2}$ (Sin efecto magnetico)

**Transmisión:** Los valores de ancho de pozo y de barreras serán constante, en este caso se tendrá un campo eléctrico de magnitud 5,la presencia del campo eléctrico implica la reducción de la transmisión, en la Fig. 31a se observa que en el canal T(UK) teniendo energías cercanas a 0 meV se tiene una pequeña región roja, (transmisión de electrones desde el ángulo -90° hasta los 90°), en T(DK) (Fig. 31b) no hay presencia de transmisión en energía cercanas a 0 meV. En ambos canales hay una franja roja en la misma región de la gráfica (~10 meV) con la diferencia de que T(UK) (Fig. 31a) es más gruesa ocupando mayor energía pero con una excelente transmisión en grados cercanos a 0 mientras que a los extremos acercándose a los 90° y -90° se va disminuyendo la probabilidad de tener una buena transmisión, en comparación de T(DK) (Fig. 31b) que es mucho menor en la probabilidad de tener una excelente cercas a 0° y se reduce más a los extremos que en T(UK).



Figura 31.- En los dos canales de los espines se puede ver un incremento de la transmisión con energías mayores a los 50 meV, pero con bajos valores de ángulo de incidencia.

Con 25 meV<E<50 meV para ambos canales, en T(UK) se ve una franja continua con transmisiones buenas cercanas a los 0° pero sutilmente en diferentes energías de esa misma región se observan picos de transmisiones en ~30°, en T(DK) se ve la ausencia de transmisión y franjas con unas transmisiones no tan favorables para el nano-dispositivo. E>50 meV la transmisión aumenta conforme la energía es mayor y se tiene una transmisión perfecta cuando se acerca a los 0°.

La variación en la función de transmisión es debida a sucesivas reflexiones de los electrones entre las superficies de las barreras y el pozo. Cuando los dos haces de electrones están en fase se da interferencia constructiva (Fig. 32a), mientras que si están fuera de fase se dará interferencia destructiva (Fig. 32b). El hecho que dos haces se encuentren o no en fase, depende de la longitud de onda, del ángulo con el atraviesen las barreras, el grosor de las barreras y el índice de refracción del material, esto es como se comportan las resonancias Fabry-Perot que se observan en la Fig. 33 (línea roja) que suceden en el nano-dispositivo.



Figura 32.- Si las ondas tienen la misma frecuencia, y están en fase, se dice que su interferencia es constructiva, dando lugar a una onda resultante de la misma frecuencia cuya amplitud es mayor que las amplitudes de las ondas originales a). Si las ondas están desfasadas 180 grados, se dice que su interferencia es destructiva, ya que, si sus amplitudes son iguales, la amplitud de la onda resultante es cero b).

En la Fig. 33 se observa la transmisión para los dos canales con cinco ángulos distintos fijos (0°,  $\pm$ 10° y  $\pm$ 30°), en la primera grafica ( $\theta$ =0°) de las tres que hay para T(UK) (Fig. 32a) se comienza con transmisiones cercanas a 0 con menores energías, mientras que la energía aumenta la transmisión llega hacer igual a 1, para T(DK) (Fig. 33b) no es perfecta la transmisión teniendo casi nula transmisión 25 meV<E<50 meV y al igual como para T(UK) a mayor energía la transmisión llega a tener un valor de 1. Para la gráfica con  $\theta = \pm 10^{\circ}$  en T(UK) (Fig. 33c) se observa los picos con valores de transmisión cercanos a 0, estos son los que se ven en la figura 31a en las energías 25 meV<E<50 meV, observamos oscilaciones de la transmisión en bajas energías, además por algunas energías específicas de transmisión igual a 1 debido a las resonancias (interferencia constructiva de las ondas al interior de las barreras y del pozo), al igual en T(DK) (Fig. 33d) se tiene para los mismos valores de energía (25 meV<E<50 meV) se observan los picos de ausencia de transmisión (T=0), esto se ven en azul de la figura 31a (región central cercanas a 0°), para ambos canales de los espines Up y Down a mayor energía la transmisión se acerca a valores de unidad. La observación para las transmisiones en  $\pm 30^{\circ}$  (Fig. 33e y f) se tiene en su mayoría de escala de energía una escasa transmisión para ambos

canales con valores en 0 y picos con valores cercanos a 1, ambas graficas parecieran ser simétricas entre sí con la diferencia que al inicio de T(UK) (Fig. 33e) se tiene más transmisión con valores superiores a 0 que los que tiene T(DK) (Fig. 33f) que sus picos llegan a 0.



Figura 33.- Las 6 graficas representan las transmisiones de cinco distintos ángulos (0°,  $\pm$ 10 y  $\pm$ 30°), a), c) y e) para los espines *Up* y b), d) y f) para los espines *Down*.

Conductancia: En la Fig. 34 se observa la conductancia de los dos espines, la conductancia del espín Up ( $G_{U}$ ) es mucho mayor a la del espín Down ( $G_{D}$ ), energías cercanas a cero (E<10 meV)  $G_{II}$  tiene una conductancia mayor a 1.5, pero se tiene un pico que reduce la conductancia cuando más energía se agrega al sistema llegando a bajar a valores inferiores a 1, mientras que  $G_D$  es mucho menor llegando por lo menos en alcanzar 0.2. Con energías de 10 meV<E<23 meV G<sub>D</sub> aumenta la conductancia a valores mayores a 1 y reduciéndose a menores de 0.5 cuando la energía alcanza los 20 meV,  $G_U$  siendo superior a  $G_D$  alcanza niveles de conductancia iguales como con menor energía (E<10 meV) pero ampliando su pico de energía, volviendo a caer sus conductancia a niveles superiores a 1 pero siempre mayor que los valores que se ven en  $G_D$ . En determinados puntos de valores de energía (23 meV<E<40 meV) hay una considerable caída de conductancia para ambos canales de espines llegando puntos en que  $G_D$  tiene valores de O conductancias teniendo el pico de resonancia más alto con valores de  $\sim 0.4$ , para  $G_{II}$  su pico máximo en esa área de energía se tiene de ~0.6. Los dos canales se "acoplan" teniendo mismos valores con energías superiores a los 40 meV (E>40 meV), esto por la excelente transmisión que se pueden ver en las anteriores graficas (Fig. 31 y 33).



Figura 34.-  $G_U$  y  $G_D$  se observa muy separadas entre sí, habiendo más conductancia para espines Up en energías bajas, cuando la energía aumenta (E>40 meV) las dos conductancias aumentan llegando acercarse a valores iguales.

## $N = 2, \vec{B}_l = \vec{B}_r = 0, U_l = U_r = 5, d_w = d_l = d_r = \frac{L}{2}$ (Con efecto magnético)

**Transmisión:** Las gráficas vistas a continuación (Fig. 35) son muy parecidas a las gráficas de la Fig. 31, solo que las de la Fig. 35 están desplazadas hacia abajo esto por la aplicación del campo magnético que se tiene en las barreras del nanodispositivo afectando la transmisión de los electrones. Se demuestra que el campo magnético rompe la simetría del mapa de transmisión en T(UK) con E<20 meV se tiene una gran región con una excelente transmisión entre -45° y 0° con excepción de 0 meV que se tiene valores de transmisión entre 0.6 y 0.4, a los extremos se encuentran picos que se extienden de 90° a -90° con muy poca probabilidad de buena transmisión. Para T(DK) con E<20 meV es muy baja la probabilidad de transmisión menor a 0.8 para ambos extremos (-90° y 90°), hay una gran región de T=0 (resonancia) que rodea la poca transmisión que existe en esas determinadas energías (E<20 meV). Para T(DK) se tiene nula transmisión para la región de energías 20 meV<E<50 meV teniendo en medio de esa región pequeñas transmisiones el cual son despreciables. Para T(UK) y T(DK) con E> 50 meV las transmisiones se van ampliando conforme la energía aumenta, teniendo la mejor transmisión en el centro de las regiones para ambos canales. Mientras que en el centro es mayor la transmisión a sus extremos la transmisión va bajando hasta valores de nula transmisión.



Figura 35.-El desplazamiento que se tiene en ambos canales (T(UK) y T(DK)) hacia abajo es por la aplicación de un campo magnético que hace que los espines se desvíen teniendo mejor transmisión en ángulos descendentes (menores a 0°).

En la Fig. 36 se observa las transmisiones para los espines *Up* y *Down* con los cinco grados 0°, ±10° y ±30°. Para  $\theta$ =0° para ambos canales *T*(*UK*) y *T*(*DK*) (Fig. 36<sup>a</sup> y Fig. 36b) E<50 meV, se observan picos de resonancias con transmisión de *T*=1. Con E<50 meV los picos de transmisión no se acercan a valores de ~0.8 en esa misma región de energía se encuentra valores nulos de transmisión salvo dos picos, uno mayor a 0 y otro con 0.5, para E>50 meV se tiene una misma apariencia que *T*(*UK*) (fig.36a) conforme la energía aumenta la transmisión los pozos disminuyen teniendo valores de T=1. En la figura 36c con  $\theta$ =±10° se observa la transmisión con ángulo positivo (línea negra) y la transmisión con ángulo negativo ( $\theta$ =−10°, línea roja), para las transmisiones para la región de energía E<50 meV que en su mayoría tiene transmisiones con valores de 0, con picos de resonancias. En la Fig. 36 se nota que la transmisión de ambos canales de +10°, -10°, +30° y -30° son diferentes, este fenómeno es debido al campo magnético en las barreras. Para *T*(*DK*) (Fig. 36d) se tiene la misma condición de energía (0 meV>E<50 meV) en su mayoría se tiene transmisiones con valores de 0, habiendo picos en energías bajas con valores mayores a 0.5 y teniendo resonancias en la misma región, con energías a mayores de 50 meV se tiene picos y pozos muy similares a los que se observan en T(DK) (Fig. 36d) que de igual forma mientras la energía aumenta los pozos y picos se vuelven a valores de transmisión igual a 1. Para el  $\theta = \pm 30^{\circ}$  en T(UK) (Fig. 36e) se tiene una gran región de nula transmisión como también para T(DK) (Fig. 36f), esto por el desplazamiento hacia abajo provocado por el campo magnético externo aplicado al nano dispositivo, siendo las dos graficas casi simétricas entre, con energía mayor a los 100 meV los picos se van incrementando a tener valores cercanos a 1 hasta llegar a una energía que deja la transmisión con valores de 0, se observan sus respectivas resonancias para ambos canales las cuales se van oscilando poco a poco hasta valores de 1.



Figura 36.- La transmisión Up y Down para diferentes ángulos de incidencia del electrón  $\theta$ =0°, ±10° y ±30° para el espín Up y espín Down.

**Conductancia:** Para  $G_U$  los valores de conductancia vistas en la Fig. 37 comienza con mayor de 0.5 a energías de ~3 meV mientras que para  $G_D$  la conductancia tiene valores muy cercanos a 0 con el mismo valor de energía ya dicha (~3 meV), teniendo la conductancia de mayor valor para energías bajas (E<60 meV) de 0.5.  $G_U$  tiende a crecer a valores cercanos a 1.2 de conductancia el valor más alto para valores de baja energía (E<60 meV), esto en aproximadamente en valores de 10 meV, una caída de conductancia en un rango de energía de 20 meV<E<45 meV llegando a tener valores mínimos de 0.2 y máximos de 0.4. Para  $G_D$  en energías de

20 meV<E<45 meV la conductancia no supera los valores de  $G_U$  en el mismo rango de energías, siendo el pico más alto para  $G_D$  de 0.3 de conductividad y la más baja en 0. Para ambos canales ( $G_U$  y  $G_D$ ) con energías mayores a 45 meV la conductancia vuelve a crecer y se van acoplando ambos hasta tener valores semejantes. En conclusión, en la Fig. 37 el campo magnético reduce la conductancia eléctrica en el espín *Down* y favorece la conductancia para el espín *Up*.



Figura 37.- La conductancia en el canal de espín Up y espín Down en función de la energía de Fermi del electrón.

**Magnetorresistencia Túnel (TMR):** Para el cálculo de la TMR se necesita calcular los valores de la conductancia global (ec.18) para paralelo (P) y antiparalelo (AP), recordar que paralelo es cuando la última barrera de la extrema derecha esta alienada en el mismo sentido que las demás barreras de la izquierda y antiparalelo es cuando el sentido de la berrera de la extrema derecha tiene un sentido opuesto a las de la izquierda (Fig. 27). La grafica dada en la figura 38 muestra la conductancia global de los electrones incidentes sin importar su estado de espín esto con función con la energía de Fermi. Con energías de 3 meV<E<sub>F</sub><20 meV la conductancia va en aumento hasta llegar a valores de conductancia ~0.8, con 20 meV<E<sub>F</sub><40 meV la conductancia cae hasta valores cercanos a 0.1 y habiendo picos entre esas energías con G~0.3. Con energías de 40 meV<E<sub>F</sub><80 meV la conductancia va en aumento hasta valores de  $G_{glob} = 1$  como también hay puntos
en donde hay caída de conductancia esto por el ángulo de los electrones incidentes (Fig. 38).



Figura 38.- Conductancia global para obtener la TMR, esto con efectos del campo magnético en el nanodispositivo.

Con los resultados de la conductancia global para las ambas orientaciones de barreras (Paralelo y Antiparalelo) se puede utilizar la ecuación 20 para la TMR global, esto para saber sus valores en función a la energía de Fermi. En la Fig. 39 se observa que no hay TMR con valores 0 meV< $E_F$ <3 meV, pero con energías de 19 meV< $E_F$ <55 meV se observan picos de TMR, habiendo dos picos con mayor TMR con energía ~33meV con valor de TMR~900% y con energía ~44 meV se tiene una TMR~1300% siendo el mayor valor. Con energías mayores a 53 meV la TMR baja hasta valores de 0.



Figura 39.- La TMR presenta picos muy elevados en determinadas energías, obteniendo un pico mayor a 1100% de TMR con energías de entre 40 meV< $E_F$ <50 meV. También hay valores de TMR=0 con forme se elevan las energías y cuando estas son muy bajas con energías menores a 20 meV.

## N = 5, $\vec{B}_l = \vec{B}_r = 0$ , $U_l = U_r = 1$ , $d_w = d_l = d_r = \frac{L}{2}$ (Con efecto magnético)

**Transmisión**: En la figura 27b representa el sistema de 5 barreras ferromagnéticas, estas le darán una variación de transmisión muy diferente como las anteriores transmisiones utilizando el sistema de 2 barreras. En la Fig.40 se observa una similitud para ambos canales, T(DK) y T(UK), lo cual los hacen casi simétricos con pequeñas variaciones de transmisión. En T(UK) (Fig. 38a) se observa una delgada línea creciente en 0 meV. Para ambos canales la probabilidad de tener una buena transmisión es muy engorrosa ya que hay puntos de la gráfica donde por un movimiento de grados mayor o menor se tendrá una probabilidad de tener una transmisión no deseable, por ejemplo, si se observa todos los grados (de 90° a - 90°) en una energía de 50 meV se puede ver diferentes regiones con distintos valores de transmisión el cual se tiene varios puntos donde la transmisión es buena, esto pasa en todas las energías mayores a 25 meV. Estas graficas se vuelven un patrón uniforme donde cada energía da varios grados de libertad para obtener varias transmisiones con valores de 1.



Figura 40.- Ambos canales tienen semejanzas entre sí, la transmisión en función de la energía y el ángulo incidente del electrón para el canal del espín *Up* y espín *Down*. Se nota que la transmisión es casi compatible en ambos canales, la única diferencia es que en pequeñas energías se tiene transmisión que en T(UK) se tiene 0 meV y en T(DK) la transmisión comienza en ~10 meV.

En la Fig. 41 se tiene las gráficas de cinco distintos ángulos (0°,  $\pm$ 10° y  $\pm$ 30°) de la transmisión, en *T*(*UK*) (Fig. 41a) se observa "ondulaciones" de transmisión al igual

que se observa en T(DK) (Fig. 41b), esto como un patrón, los picos van reduciéndose conforme las energías son más elevadas hasta llegar a valores de T=1. Para T(UK) (Fig. 41c) y T(DK) (Fig. 41d) sus graficas son muy parecidas entre sí con diferencia en bajas energías donde se puede observar un pico en valores de aproximadamente 5 meV para T(UK) (Fig. 41c) con valor de T=0.4. Para ambos canales en  $\pm 10^{\circ}$  se tiene una semejanza de transmisiones en  $\sim 30$  meV hacia altas energías teniendo una simetría entre ambos canales como también en las resonancias. Cuando más energía se tenga la transmisión tendrá valores cercanos a 1. Para las transmisiones en el ángulo de  $\pm 30^{\circ}$  se puede observar una ausencia de transmisión desde 0 meV<E<40 meV, con un pequeño pico en T(DK) (Fig. 41f) con un valor de T=0.2 aproximadamente. Con energía mayor a 40 meV las transmisiones son muy parecidas entre si al igual que sus resonancias. Recordar que las líneas negras son de angulos positivos (+10° y +30°) como también corresponde para cero y las líneas rojas para angulos negativos (-10° y -30°).



Figura 41.- Las transmisiones que se observan para los tres ángulos y para los dos espines (*Up* y *Down*) en función de la energía. Los patrones de las transmisiones de espín *Up* K y espín *Down* K son diferentes por el efecto del campo magnético.

**Conductancia:** La conductancia para los electrones de espín *Up* y *Down* se puede observar en la siguiente grafica (Fig. 40), para  $G_U$  como para  $G_D$  para energías 0 meV<E<20 meV se tiene baja conductividad teniendo el punto más alto para  $G_U$  en valor de 0.3 aproximadamente y para  $G_D$  en 0.2. Cuando E>20 meV la conductancia

para ambos canales crecen mutuamente, estando  $G_D$  siempre debajo de la conductancia de  $G_U$ , esto cambia cuando se tiene valores de energía mayores a 70 meV llegando a valores de conductancia mayores a 1.3 para ambos canales.



Figura 42.- Ambas conductancias ( $G_U$  y  $G_D$ ) con energía mayores a 20 meV su margen de crecimiento es muy similar entre ellas llegando a tener valores iguales en energías mayores a 70 meV.

**Magnetorresistencia Túnel (TMR):** Para obtener la TMR se necesita la conductancia global resultado de las conductancias de la forma paralelo y antiparalelo. Hay bajos valores de  $G_{glob}$  en energías menores a 20 meV con picos que llegan a ~0.3, y cuando las energías son mayores a 20 meV hay picos de conductancias que van en aumento. Pero, así como hay energías donde la conductancia aumenta hay energías donde esta baja a valores casi iguales a los que se tienen en los picos, cuando más energía hay mayores serán las conductancias globales.



Figura 43.- La conductancia global será mayor cuando la energía de Fermi aumente, pero también puede disminuirla en determinadas energías. Se podría decir que es proporcional y a la vez inversamente proporcional una de la otra (conductancia global y energía de Fermi), esto porque la conductancia esta como función de la energía.

Teniendo los datos de la conductancia global se puede determinar los valores de la TMR. En energías menores a los 20 meV hay variedad de TMR, habiendo un pico muy elevado en energías entre 3 meV< $E_F$ < 6 meV aproximadamente con una TMR~2600%. La TMR va disminuye en energías de 6 meV< $E_F$ <12 meV llegando a valores TMR~0%, de igual forma hay subidas y bajadas de TMR en valores de 12 meV< $E_F$ <20 meV con el pico de TMR mayor con un valor ~600%. La TMR va a la baja con valores cercanos a ceros cuando las energías son de 20 meV< $E_F$ <25 meV, y cuando la energía es mayor a 25 meV la TMR llega a hacer cero para todas las energías mayores.



Figura 44.- Se tiene TMR en energías menores a los 20 meV con diferentes valores, con mayor de 20 meV la TMR va decayendo hasta tener valores del 0%.

## **Conclusión**

De manera general, hemos estudiado las propiedades de la transmisión y conductancia en el nano-dispositivo basado en siliceno esto en dos sistemas diferentes, tales sistemas son: dos barreras y cinco barreras. Mediante el Hamiltoniano de bajas energías alrededor del punto de Dirac para describir el siliceno con efectos de campos eléctricos y magnéticos. Para estudiar las propiedades de transmisión utilizamos el método de matriz de transferencia, mientras con la formulación de Landauer-Büttiker las propiedades de transmisión como función de la energía variando los parámetros que caracterizan a los sistemas con el ángulo de incidencia de los electrones, para la conductancia en función de la energía de Fermi. Los resultados son:

- Las propiedades y resultados de la transmisión y conductancia pueden ser variados por sus parámetros (ángulo, energía, numero de barreras, altura de barreras, ancho del pozo, etc.).
- Para las simulaciones hechas a la transmisión de ángulos establecidos (0°, ±10° y ±30°) se observan resonancias para ambos sistemas (dos barreras y cinco barreras), tales resonancias son sensibles a anchos de barrera y pozos, a los altos de barrera y así como al número de barreras.
- 3. Los valores de las energías en cada escenario propuesto dependerán de los ángulos, campos eléctricos, campos magnéticos, número de barreras y el tipo de espín del electrón que pase por el nano-dispositivo, es aventurado decir con exactitud que tanto varia la energía sin establecer bien los parámetros que esta depende.
- 4. La conductancia se representa en curvas con comportamiento oscilante.
- La TMR solo observa en el nano-dispositivo cuando este tiene efectos magnéticos, la TMR tendrá valores diferentes en diferentes energías de Fermi.

En lo que es esta tesis se pudo determinar las propiedades de transmisión, conducción y magnetorresistencia túnel (TMR) vistas desde el punto de la espíntrónica de un modelo matemático que se fue desarrollando durante varias

investigaciones de distintos científicos para darle validez a las teorías del comportamiento del siliceno y estas teorías hacerlas practicas en la electrónica al sintetizar el siliceno que se usara en el nano-dispositivo que ayudara a darle la razón a las teorías propuestas.

## **Bibliografía**

[1] Kittel, C, (2005), Introduction to solid state physics, E.U., John Wiley & sons, Inc[2] F. Pierret, R, (1988), Fundamentos de semiconductores, E.U, Addison-Wesley Iberoamericana.

[3] K. V., Shalímova, (1975), Fisica de los semiconductores, Moscú, URSS, Mir.

[4] Bernardo, A, (2014), ¿Qué es la espíntrónica?,

URL:https://blogthinkbig.com/que-es-la-espintronica

[5] S., Teruya, (2009), Nanomagnetism and Spintronics, Amsterdam, Netherlands, Elservier.

[6] Dietl T., Awschalom D.D., Kaminska M., Ohno H., (2008), Spintronics Amsterdam, Netherlands, Elservier.

[7] Giulia C. Lombardi, Ginevra E. Bianchi, (2009), Spintronics: Materials,

Applications, and Devices, New York, E.U., Nova Science Publishers.

[8] Gratton, J, (2003), Introducción a la mecánica cuántica, Buenos Aires, Argentina

[9] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, (1986), Mecanica cuántica no-Relativista, Barcelona, España, Reverté.

[10] Young, Hugh, D., Roger, A. Freedman, (2009), Física universitaria Volumen 1,D.F. México, Pearson Educacion

[11] (2009), Mecanica cuántica: El acoplamiento LS, URL: <u>http://la-mecanica-</u> cuantica.blogspot.com/2009/08/el-acoplamiento-ls.html

[12] Neil W. A., N. D. Mermin, (2010), Solid state physics, New York, E.U., Holt, Rinehart and Winston

[13] Hlawiczka, P. "Introducción a la electrónica cuántica", Barcelona, España, Reverté, P.504, (1977).

[14] Poole, Charles P. Jr., Owens, Frank J., "introducción a la nanotecnología", Barcelona, España, Reverté, p. 418, (2007)

[15] Molle, A., Goldberger, J., Houssa, M., Yong Xu, Shou-Cheng Zhang.

Akinwande, D., Nature materials, v. 16, p.163–169 (2017).

[16] Houssa, M., Dimoulas, A., Molle, A., (2016), "2D Materials for

Nanoelectronics", New York, E.U., CRC Press Taylor & Francis Group.

[17] Dávila, M. E.; L. Xian, S. Cahangirov, A. Rubio, G. Le Lay), New Journal of Physics, v. 16 (9). p. 95002, (2014).

[18] Park, Jong-Hyeok; Suzuki, Tsuneharu; Kurosawa, Masashi; Miyao, Masanobu; Sadoh, Taizoh, Appl. Phys. Lett, v.103 (8). p. 082102, (2013).

[19] Ni, Zeyuan; Qihang, Liu; Tang, Kechao; Zheng, Jiaxin; Zhou, Jing; Qin, Rui;

Gao, Zhengxiang; Yu, Dapeng; Lu, Jing, Nano Lett. 12 (1): 113–118, (2011)

[20] S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Aktürk, H. C. Sahin and S. Ciraci, Physical Review Letters, v. 102, No. 23, p. 236804, (2009).

[21] P. W. Bridgman, J. Am. Chem. Soc., (1914), 36, 1344–1363.

[22] H. Liu, A. T. Neal, Z. Zhu, Z. Luo, X. Xu, D. Tománek, P. D. Ye.," ACS Nano, v. 8, p.4033–4041, (2014).

[23] L. Li, Y. Yu, G. J. Ye, Q. Ge, X. Ou, H. Wu, D. Feng, X. H. Chen, Y. Zhang, Nat. Nanotechnol, 9, 372–377, (2014)

[24] A. K. Geim and K. S. Novoselov, Nat. Mater, v.6, p.183, (2007).

[25] 13. P. R. Wallace, Phys. Rev. 71, 622, (1947).

[26] G. W. Semenoff, Phys. Rev. Lett. v.53, p.2449, (1984.)

[27] Calzada Miguel, (5 de octubre de 2010.) "Próximamente en sus pantallas: el grafeno" El País de España. URL:

https://elpais.com/diario/2010/08/06/sociedad/1281045601\_850215.html

[28] Takeda, K., Shiraishi, K., Phys. Rev. B, v. 50, p. 14916–14922 (1994).

[29] Guzmán-Verri, G.G., Lew Yan Voon, L.C., Phys. Rev. B. v.76, 075131 (2007).

[30] Seymur Cahangirov, Mehmet Topsakal, Ethem Aktürk, H Şahin, Salim Ciraci, Phys. Revi., v.102, No. 23, p. 236804, (2009).

[31] Nakano, H.; Mitsuoka, T.; Harada, M.; Horibuchi, K.; Nozaki, H.; Takahashi,

N.; Nonaka, T.; Seno Y. y Nakamura H., Angewandte Chemie-International Edition. v.45, p.6303-6306, (2006).

[32] Chun-Liang, Lin; Ryuichi, Arafune; Kazuaki, Kawahara; Noriyuki, Tsukahara;Emi, Minamitani; Yousoo, Kim; Noriaki, Takagi y Maki, Kawai. Applied PhysicsExpress. v.5, p.045802, (2012).

[33] Rubio P. P., Noboru T., (2013), Siliceno, una nueva mirada al silicio en dos dimensiones, D.F., Mexico, UNAM, www.mundonano.unam.mx [34] Li Tao, Cinquanta, E., Chiappe, D., Grazianetti C., Fanciulli, M., Dubey, M., Molle A., Akinwande, D., Nature nanotecnology, v.10, p. 227-231 (2015). [35] W. Thomson. Proc. Roy. Soc., v.8, p.546, (1857). [36] R. C. O'Handley, (1999). "Modern magnetic materials, principles and applications", U.E.A, Wiley. [37] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, and W. Zinn. "Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange". Phys. Rev. B, v.39, p.4828(R), (1989). [38] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas. Phys. Rev. v. 61, p. 2472. (1988) [39] The Nobel Prize, (2007), The Nobel Prize in Physics 2007, Suecia, URL: https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2007/press-release/ [40] B. Dieny, V. S. Speriosu, S. S. P. Parkin, B. A. Gurney, D. R. Wilhoit, and D. Mauri, Phys. Rev. B v.43, p. 1297-1300, (1991). [41] Behrish, Rainer, "Sputtering by Particle Bombardment", Topics in Applied Physics, v.6. (1981) [42] P.M. Tedrow, R. Meservey, Phys. Rev. Lett. v. 26, p. 192, 1971. [43] P.M. Tedrow , R. Meservey, Phys. Rev. B v.7, p.318 (1973). [44] M. Julliére, Phys. Lett., v. 54 A, No.3, p. 225-226, (1975). [45] W. J. Gallagher, J. H. Kaufman, S. S. P. Parkin, R. E. Scheuerlein, "magnetic memory array using magnetic tunnel junction devices in the memory cells", United States Patent, Numero de patente: 5 640 343, Código: US005640343A, (1997). [46] Peña, Luis de la, "Introducción a la mecánica cuántica", DF, México, Fondo de cultura económica, p.964, (2006). [47] C. W: Searle, S. T. Wang, Can. J. Phys, v.49, No.3, p.387-390, (1971). [48] R. von Helmolt, Meeker, B. Holzapfel, L. Schultz, y K. Samwer. Phys. R. Lett., v.71, No. 14, p. 2331-2333, (1993).

[49] Oubram, O., Navarro, O. Guzmán, E.J., Rodríguez-Vargas, I., Elsevier, v.113, p. 483-496, (2018).

- [50] Y. Wang, Y. Lou, J. Appl. Phys. 114 (2013) 183712.
- [51] D. Wang, Z. Huang, Y. Zhang, G. Jin, Phys. Rev. B 93 (2016) 195425.
- [52] S. Rachel, M. Ezawa, Phys. Rev. B 89 (2014) 195303.
- [53] P.P. Freitas, R. Ferreira, S. Cardoso, F. Cardoso, J. Phys. Condens. Matter 19 (2007) 165221.
- [54] S. Stuart, et al., Nat. Mater. 3 (2004) 862.
- [55] C. Xu, G. Luo, Q. Liu, J. Zheng, Z. Zhang, S. Nagase, Z. Gao, J. Lu, Nanoscale 4 (2012) 3111.
- [56] J. Kang, F. Wu, J. Li, Appl. Phys. Lett. 100 (2012) 233122.
- [57] D. Zhang, M. Long, X. Zhang, C. Cao, H. Xu, M. Li, K. Chan, Chem. Phys.

Lett. 616 (2014) 178

[58] X.J. Qiu, Y.F. Cheng, Z.Z. Cao, J.M. Lei, J. Phys. D. Appl. Phys. 48 (2015) 465105.

- [59] R. Saxena, A. Saha, S. Rao, Phys. Rev. B 92 (2015) 245412.
- [60] F. Zhai, K. Chang, Phys. Rev. B 77 (2008) 113409.
- [61] N.D. Drummond, V. Zólyomi, V.I. Fal'Ko, Phys. Rev. B 85 (2012) 075423.
- [62] T. Yokoyama, Phys. Rev. B 87 (2013) 241409R.
- [63] C.C. Liu, H. Jiang, Y.G. Yao, Phys. Rev. B 84 (2011) 195430.
- [64] S. Datta, Electronic Transport in Mesoscopic Systems, Cambridge University Press, 1995.