



**UNIVERSIDAD AUTONOMA DEL ESTADO DE  
MORELOS**

**INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS**

**CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS**

# **Propiedades de transporte en Thue-Morse en grafeno**

**TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE:  
DOCTOR EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS**

**ENRIQUE ARTURO CARRILLO DELGADO**

**DIRECTORES:**

**LUIS MANUEL GAGGERO SAGER  
JOSÉ ALFREDO HERNANDEZ PÉREZ**

**CUERNAVACA, MORELOS**

**Febrero, 2019**



DOCTORADO EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS, UNIVERSIDAD AUTÓNOMA  
DEL ESTADO DE MORELOS

Esta investigación fue realizada bajo la supervisión del Dr. Luis Manuel Gaggero Sager  
con el soporte financiero del CONACYT para estudiantes de doctorado, desde el año  
2015 al 2019.

*Final release, Enrique 2019*



*Para  
Alma Araceli Moreira Landeros*



## **Agradecimientos**

Éste espacio es para brindarles reconocimiento a todas las personas que influyeron de manera importante para el mejor desempeño y funcionamiento de mi persona para que este proyecto de investigación se concluyera con éxito. Primeramente, quiero agradecer a mis asesores Luis Manuel Gaggero Sager y José Alfredo Hernandez Pérez.

En segundo lugar quiero agradecer al CIICAp por abrirme las puertas y darme la oportunidad de seguirme preparando. Igualmente, el CONACYT merece mi gratitud por el apoyo económico que me otorgó.

También debo mi agradecimiento a Isaac Rodriguez Vargas por su apoyo y por compartir su conocimiento siempre que he necesitado.

Por último, quiero expresar mi gratitud a mi esposa Alma Araceli Moreira Landeros por su amor, compañía y apoyo insistente.





## Resumen

Los sistemas aperiódicos o cuasiregulares así como el descubrimiento del primer material bidimensional (grafeno) son, por separado, dos temas fundamentales dentro del campo de la Física de la materia condensada. Los dos sistemas presentan propiedades sorprendentes y útiles para el desarrollo tanto tecnológico como científico. En este sentido, la unión de estos dos sistemas busca ampliar los alcances de las mismas.

Para el presente trabajo se usó la secuencia aperiodica Thue-Morse, la cual sigue la regla de sustitución;  $g(A) = AB$ ,  $g(B) = BA$ . Donde A y B representan regiones con y sin barrera de potencial respectivamente. Específicamente, se consideran dos sistemas: 1) la barrera de potencial es generada por medio de potencial electrostático aplicado perpendicularmente a la sábana de grafeno, y 2) la barrera de potencial es obtenida a través de sustratos que interaccionan fuertemente, sustratos que rompen la simetría del grafeno, con la monocapa de grafeno. Dentro de las peculiaridades que acarrearán los sistemas mencionados se encuentran la no masividad de los electrones de Dirac y la presencia del tunelaje Klein para el primero de ellos (Barreras Electroestáticas), y la apertura de brecha de energía prohibida o gap, la masividad de los electrones de Dirac y la supresión del efecto Klein en el segundo de ellos (Barreras con Sustratos).

Se empleó el método de la matriz de transferencia para estudiar teóricamente las propiedades de transmisión, transporte y estructura de bandas de sistemas multicapas cuasiregulares en grafeno basados en la secuencia Thue-Morse. En particular, se analizan las propiedades mencionadas anteriormente al variar el ancho de la región de la barrera (región  $q$ ), el ángulo de incidencia, la energía de incidencia del electrón y el número de generación de la secuencia Thue-Morse. En este sentido, se busca bajo que condiciones se manifiestan las características típicas de los sistemas cuasiregulares en las propiedades de transmisión y transporte de los electrones de Dirac. Adicionalmente, se efectúa el cálculo de los estados acotados de los electrones de Dirac para así poder analizar el comportamiento oscilatorio de la conductancia. Por último, se estudiará el efecto Klein y su impacto en las propiedades de transporte.



## Abstract

The aperiodic or quasiregular systems as well as the discovery of the first two-dimensional material (graphene) are, separately, 2 fundamental subjects in the field of the physics of the condensed matter. The two systems present surprising and useful properties for both technological and scientific development. In this sense, the union of these two systems seeks to broaden their scope.

For this work the aperiodic sequence Thue-Morse was used, which follows the rule of substitution;  $g(A) = AB$ ,  $g(B) = BA$ .

where A and B represent regions with and without potential barrier respectively. Specifically, two systems are considered: 1) The potential barrier is generated by means of electrostatic potential applied perpendicularly to the graphene sheet, and 2) the potential barrier is obtained through strongly interacting substrates breaking the graphene symmetry, in the graphene monolayer. Among the peculiarities that bring the mentioned systems are the non-massiveness of the Dirac electrons and the presence of the Klein tunneling for the first one (Electrostatic Barriers), and the opening of the gap of forbidden energy or gap, the massiveness of the Dirac electrons and the deletion of the Klein effect in the second one (Barriers with Substrates).

The transfer matrix method was used to theoretically study the properties of transmission, transport and band structure of quasiregular multilayer systems in graphene based on the Thue-Morse sequence. In particular, the aforementioned properties are analyzed by varying the width of the barrier region (region  $q$ ), the angle of incidence, the incidence energy of the electron and the generation number of the Thue-Morse sequence. In this sense, it is sought under what conditions the typical characteristics of the quasiregular systems in the properties of transmission and transport of the Dirac electrons are manifested. Additionally, the calculation of the bounded states of the Dirac electrons is carried out in order to analyze the oscillation behavior of the conductance. Finally, the Klein effect and its impact on transport properties will be studied.





# Índice general

Dedicatoria .....	5
Agradecimientos .....	7
Resumen .....	9
Abstract .....	11
Índice .....	11
Lista de figuras .....	15
<b>1</b> <b>Introducción</b> .....	<b>21</b>
1.1 Futuro de la electrónica	21
1.2 Sistemas bidimensionales	21
1.3 Orden	22
1.4 Cuasicristales	22
1.5 Secuencias Aperiódicas	23
1.5.1 Secuencia Thue-Morse .....	24
1.6 Heteroestructuras Cuasirregulares	25

<b>1.7</b>	<b>Antecedentes</b>	<b>26</b>
<b>1.8</b>	<b>Motivación</b>	<b>27</b>
<b>1.9</b>	<b>Objetivos</b>	<b>28</b>
<b>2</b>	<b>Metodología</b>	<b>31</b>
<b>2.1</b>	<b>Matriz de Transferencia</b>	<b>31</b>
2.1.1	Caso electrostático	32
2.1.2	Caso sustratos	36
<b>2.2</b>	<b>Transporte eléctrico</b>	<b>36</b>
2.2.1	Resistencia eléctrica	36
2.2.2	Longitud de onda de Fermi	37
2.2.3	Camino libre medio	37
2.2.4	Longitud de relajación de fase	37
<b>2.3</b>	<b>Formalismo de Landauer</b>	<b>38</b>
2.3.1	Resistencia de un conductor balístico	38
2.3.2	Resistencia de contacto	40
2.3.3	Fórmula de Landauer	41
2.3.4	Conductancia a temperatura finita y a voltaje finito	44
2.3.5	Conductancia en sistemas de grafeno	47
<b>2.4</b>	<b>Estados Acotados</b>	<b>48</b>
<b>3</b>	<b>Resultados y Discusión</b>	<b>51</b>
<b>3.1</b>	<b>Sistema electrostático</b>	<b>52</b>
3.1.1	Probabilidad de Transmisión	52
3.1.2	Transporte electrónico	58
3.1.3	Ingeniería de Band Gap	60
3.1.4	Estados Ligados	63
<b>3.2</b>	<b>Sistema sustrato</b>	<b>64</b>
3.2.1	Probabilidad de Transmisión	64
3.2.2	Transporte electrónico	69
3.2.3	Estados Ligados	72
<b>4</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>75</b>
<b>5</b>	<b>Investigación extra</b>	<b>77</b>
<b>5.1</b>	<b>Derivada numérica</b>	<b>77</b>
5.1.1	Derivadas de orden superior	78

5.2	Derivación con tres puntos	78
5.3	Ejemplo	83
	<b>Bibliografía</b> .....	<b>85</b>







# Índice de figuras

- 1.1 Imagen de un cuasicristal desde un microscopio electrónico [21,22]. . . . . 23
- 1.2 Lista de las reglas de sustitución que determinan las secuencias que son usualmente consideradas en el estudio de estructuras aperiódicas. . . . . 24
- 1.3 Representación esquemática de: a) heteroestructura con orden periódico, y b) heteroestructura formada con un orden cuasiperiódico Thue-Morse. . . . . 25
- 1.4 Diagrama de la sección transversal, esquema de la relación de dispersión y representación energética del sistema (a) electrostático y (b) sustratos. La estructura electrostática se genera al colocar dos contactos (EP) o puertas (TG) en la sábana de grafeno, la cual es depositada sobre  $SiO_2$  (región roja), produciendo un desplazamiento de los conos de Dirac en las regiones donde se aplica campo electrostático y generando así un arreglo de barreras de potencial de altura  $V_0$ , equivalente al voltaje aplicado. La estructura referente a los sustratos se genera al depositar la sábana de grafeno sobre sustratos mixtos de  $SiO_2-SiC$ , donde la región azul representa al sustrato SiC, dando origen a regiones con y sin brecha prohibida, en esta ocasión la relación de dispersión es parabólica reproduciendo justamente un arreglo de barreras de altura  $t'$ . En ambos casos la puerta inferior (BG) se usa para controlar el nivel de Fermi (límite superior en las regiones verdes de los conos) y el tipo de dopaje (n o p) en los sustratos. La esfera azul representa un electrón de Dirac incidiendo con una energía de Fermi ( $E_F$ ). . . . . 29
- 2.1 Sistema multicapas de grafeno, aquí se muestran las matrices dinámicas y de propagación correspondientes a las diferentes regiones que conforman el sistema. . . . . 32

2.2	(Izquierda) Regiones de interés. (Derecha) Vectores de onda. . . . .	32
2.3	(a) Sistema conformado por un conductor balístico y conectado a dos contactos no reflectivos, bajo la acción de un potencial externo. (b) Relaciones de dispersión para diferentes modos transversales o subbandas pertenecientes al conductor, $\mu_1$ representa el cuasi-nivel de Fermi para los estados $+k$ mientras que $\mu_2$ representa los estados $-k$ . Las diferentes subbandas son indicadas por N. . . . .	39
2.4	(a) Diagrama representativo de un conductor balístico y dos grandes contactos. (b) Densidad de estados para los contactos, los cuales tienen un alto número de modos (área sombreada) tal que los cuasi-niveles de Fermi son casi iguales, por el contrario, el conductor tiene pocos modos de forma tal que los cuasi-niveles de Fermi son distintos. (c) Variación del potencial electroquímico entre los dos contactos. . . . .	41
2.5	Arriba. Representación de la probabilidad de transmisión $T$ propia de un conductor conectado a dos grandes contactos no reflectivos por medio de dos conductores balísticos, asignados como 'lead1' y 'lead 2'. Abajo. Esquema del flujo de corriente a través del conductor, $I_1^+$ , $I_1^-$ y $I_2^+$ representan la corriente saliente del Lead 1, la reflejada del Lead 1 y la transmitida por el Lead 2, respectivamente. . . . .	42
2.6	Esquema de variación de $\bar{T}(E)$ a bajas temperaturas. . . . .	46
2.7	Sistema multicapas de grafeno conformado por $N - 1$ pozos de potencial, aquí se muestran las matrices dinámicas y de propagación correspondientes a las diferentes regiones del sistema. . . . .	48
3.1	Caso electrostático: Representación de los potenciales para la estructura de grafeno con una sucesión aperiódica Thue-Morse. . . . .	52
3.2	Transmitancia vs Energía, ángulo fijo $30^\circ$ , generaciones $N = 3, 5$ y $7$ (de arriba hacia abajo) para un sistema aperiódico Thue-Morse (primer columna), sistema periódico (segunda columna) y una comparación entre los dos sistemas (tercer columna). . . . .	53
3.3	Gráfica detallada de la Transmitancia como función de la Energía, ángulo fijo $30^\circ$ , generaciones $N = 3, 5$ y $7$ (de arriba hacia abajo). . . . .	54
3.4	Transmitancia vs Energía, ángulo fijo $45^\circ$ , generaciones $N = 3, 5$ y $7$ (de arriba hacia abajo) para un sistema aperiódico Thue-Morse (primer columna), sistema periódico (segunda columna) y una comparación entre los dos sistemas (tercer columna). . . . .	55
3.5	Gráfica detallada de la Transmitancia en función de la Energía, ángulo fijo $45^\circ$ , generaciones $N = 3, 5$ y $7$ (de arriba hacia abajo). . . . .	56
3.6	Transmitancia vs Ángulo, energía fija $E = 0.05$ eV, generaciones $N = 3, 5$ y $7$ (de arriba hacia abajo) para un sistema aperiódico Thue-Morse (primer columna), sistema periódico (segunda columna) y una comparación entre los dos sistemas (tercer columna). . . . .	57

3.7	Transmitancia vs Ángulo, energía fija $E = 0.1$ eV , generaciones $N = 3, 5$ y $7$ (de arriba hacia abajo) para un sistema aperiódico Thue-Morse (primer columna), sistema periódico (segunda columna) y una comparación entre los dos sistemas (tercer columna). . . . .	58
3.8	Conductancia vs Energía de Fermi, generaciones $N = 3, 5$ y $7$ para un sistema periódico (línea azul) y sistema aperiódico Thue-Morse (línea roja). . .	59
3.9	Contornos de Transmisión, generaciones $N = 3, 5, 7$ para el sistema aperiódico Thue-Morse (Arriba) y para un sistema periódico (Abajo). . . . .	60
3.10	Transmitancia vs Energía para TM-GSLs con (a) $N = 5$ y (b) $N = 7$ . Como referencia, se ha incluido la transmitancia de las periódicas-GSLs, curvas azules. El ángulo de incidencia considerado es $\theta = 30^\circ$ . Los parámetros de superposición son: $V_0 = 1.0$ eV y $d_B = d_W = 10$ . Con la distancia carbono-carbono en el grafeno, $0.142nm$ . El número de barreras en las superred periódica y la aperiódica es el mismo. . . . .	61
3.11	Lo mismo que en la Fig. 3.10, pero aquí el ángulo de incidencia es $45^\circ$ . . . . .	61
3.12	Contornos de Transmisión, generaciones $N = 5, 7$ para el sistema aperiódico Thue-Morse (Arriba) y para un sistema periódico (Abajo). . . . .	62
3.13	Espectro de estados acotados como función de $k_y$ , generaciones $N = 3, 5$ y $7$ para el sistema aperiódico Thue-Morse (primer columna), un sistema periódico (segunda columna) y la comparación de los dos casos (tercer columna). . . . .	63
3.14	Caso sustrato: Representación de los potenciales para la estructura de grafeno con una sucesión aperiódica Thue-Morse. . . . .	64
3.15	Transmitancia vs Energía, ángulo fijo $30^\circ$ , generaciones $N = 3, 5$ y $7$ (de arriba hacia abajo) para un sistema aperiódico Thue-Morse (primer columna), sistema periódico (segunda columna) y una comparación entre los dos sistemas (tercer columna). . . . .	65
3.16	Gráfica detallada de la Transmitancia en función de la Energía, ángulo fijo $30^\circ$ , generaciones $N = 3, 5$ y $7$ (de arriba hacia abajo). . . . .	66
3.17	Transmitancia vs Energía, ángulo fijo $45^\circ$ , generaciones $N = 3, 5$ y $7$ (de arriba hacia abajo) para un sistema aperiódico Thue-Morse (primer columna), sistema periódico (segunda columna) y una comparación entre los dos sistemas (tercer columna). . . . .	67
3.18	Gráfica detallada de la Transmitancia en función de la Energía, ángulo fijo $45^\circ$ , generaciones $N = 3, 5$ y $7$ (de arriba hacia abajo). . . . .	68
3.19	Transmitancia vs Ángulo, energía fija $E = 0.1$ eV, generaciones $N = 3, 5$ y $7$ (de arriba hacia abajo) para un sistema aperiódico Thue-Morse (primer columna), sistema periódico (segunda columna) y una comparación entre los dos sistemas (tercer columna). . . . .	69
3.20	Transmitancia vs Ángulo, energía fija $E = 0.15$ eV , generaciones $N = 3, 5$ y $7$ (de arriba hacia abajo) para un sistema aperiódico Thue-Morse (primer columna), sistema periódico (segunda columna) y una comparación entre los dos sistemas (tercer columna). . . . .	70

3.21	Conductancia vs Energía, generaciones $N = 3, 5$ y $7$ para un sistema periódico (línea azul) y sistema aperiódico Thue-Morse (línea roja). . . . .	71
3.22	Gráfica detallada de la Conductancia vs Energía, generaciones $N = 3, 5$ y $7$ para un sistema periódico (línea azul) y sistema aperiódico Thue-Morse (línea roja). . . . .	71
3.23	Contornos de Transmisión, generaciones $N = 3, 5, 7$ para el sistema aperiódico Thue-Morse (Arriba) y para un sistema periódico (Abajo). . . . .	72
3.24	Espectro de estados acotados como función de $k_y$ , generaciones $N = 3, 5$ y $7$ para el sistema aperiódico Thue-Morse (primer columna), un sistema periódico (segunda columna) y la comparación de los dos casos (tercer columna). . . . .	73



# 1. Introducción

## 1.1 Futuro de la electrónica

La electrónica moderna está basada en materiales semiconductores. Uno de los más usados es el silicio, se puede encontrar en la mayoría de diodos, transistores, circuitos integrados y microprocesadores. Y a pesar de que toda ésta tecnología tiene más de 60 años, parecía que el silicio no podía ser remplazado. Pero en el 2004 se descubrió un material con propiedades nunca antes vistas, por ejemplo hablando de la conducción eléctrica, es hasta diez veces mejor conductor que el silicio. Ése material es el grafeno, es el primer material bidimensional de orden nanométrico y tiene, además de la conducción eléctrica, extraordinarias propiedades de conducción térmica, es transparente, flexible y de dureza excepcional. Así es como se pensó en el grafeno [1] como el material que revolucionara la electrónica, trayendo dispositivos más pequeños, más rápidos, más flexibles y más eficientes comparados con aquellos hechos de silicio. Sin embargo, uno de los principales inconvenientes para que esto ocurra es la falta de un band gap o banda prohibida. Esto quiere decir que para poder crear los dispositivos electrónicos mencionados, el grafeno necesita comportarse como un semiconductor, ya que no cuenta con un GAP su comportamiento es mas parecido al de un metal.

Actualmente, existen diferentes técnicas para crear y modular el GAP electrónico en el grafeno

## 1.2 Sistemas bidimensionales

El grafeno es un material nanométrico bidimensional, fue obtenido en 2004 por exfoliación micromecánica del grafito. Está compuesto por átomos de carbono ordenados en forma de un panal de abeja, con un grosor de un átomo de carbono (0.1 nm). La atención que ha atraído desde su descubrimiento [1–3], es debida a las extraordinarias propiedades

que exhibe ya que sirve como puente natural entre la física del estado sólido y la electrodinámica cuántica [4–6], así como por sus posibles aplicaciones tecnológicas [7–10]. Lo anterior se debe esencialmente a su estructura particular de bandas, esto es, el grafeno es un semimetal con una brecha prohibida de energía de ancho cero con una relación de dispersión lineal cerca de los puntos  $K$  en la zona de Brillouin [11], permitiendo que los electrones se comporten como partículas relativistas a pesar que se mueven a velocidades mucho menores que la velocidad de la luz,  $v_F = c/300$ . Esta peculiaridad trae consigo características tales como alta movilidad, conductividad mínima y el tunelamiento Klein [2, 3, 12–17], efectos que no se presentan en un semiconductor tradicional con relación de dispersión parabólica. En el caso de la conductividad mínima se ha demostrado experimentalmente que el carácter de los portadores, electrones o huecos, puede ser controlado por medio de voltaje aplicado dependiendo del signo del mismo. En la transición de transporte de electrones a huecos la conductividad muestra un valor mínimo diferente de cero,  $\sigma_{min} = 4e^2/h$  [1–3], el cual impone serias limitaciones a la corriente mínima que un Transistor de Efecto de Campo puede transportar.

El descubrimiento de grafeno, y sobre todo el éxito que ha tenido, ha mostrado el camino para crear otros materiales bidimensionales [18–20]. Todos estos nuevos materiales muestran características y comportamientos sorprendentes. El número de campos donde estos material podrían ser usados es tan amplio como el número de materiales de dos dimensiones que actualmente existen.

### 1.3 Orden

El orden es una de las características principales de la naturaleza. Hay orden en las propiedades básicas de la mayoría de los sistemas físicos, químicos y biológicos. Sin embargo, en la mayoría de los casos, cuando pensamos en orden normalmente nos limitamos a considerar solo el orden periódico. La esencia de la periodicidad se basa en un patrón básico que se repite indefinidamente, junto con un conjunto de reglas básicas que prescriben la forma en que tal proceso de repetición se lleva a cabo. La periodicidad puede ocurrir en tiempo, espacio, o simultáneamente en ambos de ellos. A pesar de ello, los avances en varios campos de investigación han dado lugar a un cambio progresivo del paradigma en las últimas décadas, ya que el concepto de orden sin periodicidad ha surgido para describir correctamente un número cada vez mayor de los sistemas complejos. De esta manera, el estudio de los fenómenos que presentan arreglos aperiódicos de la materia en el espacio y/o tiempo ha sido estimulado, y el conocimiento básico obtenido de estos estudios se ha extendido, naturalmente, a los dominios de investigación aplicada. Por lo tanto, los nuevos diseños basados en el ordenamiento aperiódico de los diferentes bloques de construcción están allanando el camino para prometedoras aplicaciones tecnológicas.

### 1.4 Cuasicristales

Un cuasi-cristal es una estructura perfectamente ordenada, que a diferencia de los cristales, no presenta ninguna simetría de traslación. Éstos se empezaron a estudiar cuando en

1984, D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias y J. W. Cahn dieron a conocer las propiedades cristalográficas de una muestra de una aleación de aluminio y manganeso enfriada rápidamente [21, 22]. En un experimento de difracción con electrones la muestra presentaba una simetría prohibida de orden 5. Los resultados mostraban que el material poseía un orden de largo alcance, puesto que átomos situados en diferentes partes de la muestra reflejaban el haz de electrones de la misma forma. La simetría de la figura se mantenía constante con independencia de la posición relativa de la muestra con respecto al haz. Ese mismo año, Levine y Steinhardt [23] interpretaron esto como un nuevo estado de la materia, llamado cuasicristal, tras la observación de una peculiar distribución de los átomos de ciertos sólidos, esta ordenación consiste en un estado intermedio entre gas (átomos desordenados) y cristal (átomos perfectamente ordenados).

La mayoría de los cristales se basan en celdas unitarias sencillas, como el cubo, el tetraedro y el octaedro. Sin embargo, la celda unitaria de estos nuevos materiales se basa en el icosaedro, un polígono formado por 20 caras, cada una de las cuales es un triángulo equilátero.

Ya que dichos elementos presentan difracción de Bragg en su interior comparten algunas de las propiedades de los cristales, aunque se diferencian de ellos por el hecho de no presentar ninguna estructura repetitiva.

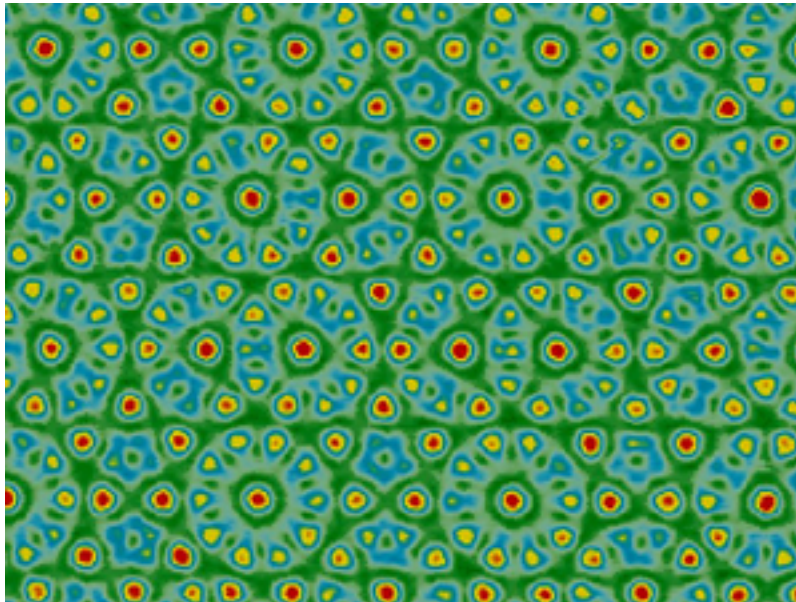


Figura 1.1: Imagen de un cuasicristal desde un microscopio electrónico [21, 22].

## 1.5 Secuencias Aperiódicas

El concepto de cuasicristal, además de introducir un nuevo estado, reforzó un concepto matemático que ya había aparecido en Química y Biología, y que estaba empezando a hacerlo en física de la materia condensada: el orden aperiódico.

Una forma sencilla de apreciar este orden se obtiene al considerar la versión unidimensional de un cuasicristal. Si se hace una proyección adecuada, se observará que hay dos tipos de distancias entre átomos, a las que se llamará  $A$  y  $B$ , que siguen una secuencia aperiódica. Se puede consultar el trabajo de E. Maciá [24], en el que se da una descripción más detallada de las posibles aplicaciones de las secuencias aperiódicas en la ciencia y la tecnología.

Existen una gran variedad de secuencias cuasiregulares y entre ellas, la de Fibonacci ha sido, sin duda, la más estudiada, desde que fuera introducida por Leonardo de Pisa (más conocido por Fibonacci) en 1202 como resultado de su investigación sobre el crecimiento de una población de conejos.

Sequence	Set $L$	Substitution rule			
Fibonacci	$\{A, B\}$	$g(A) = AB$	$g(B) = A$		
Thue–Morse	$\{A, B\}$	$g(A) = AB$	$g(B) = BA$		
Period-doubling	$\{A, B\}$	$g(A) = AB$	$g(B) = AA$		
Silver mean	$\{A, B\}$	$g(A) = AAB$	$g(B) = A$		
Bronze mean	$\{A, B\}$	$g(A) = AAA$	$g(B) = A$		
Copper mean	$\{A, B\}$	$g(A) = ABB$	$g(B) = A$		
Nickel mean	$\{A, B\}$	$g(A) = ABBB$	$g(B) = A$		
Triadic Cantor	$\{A, B\}$	$g(A) = ABA$	$g(B) = BBB$		
Rudin–Shapiro	$\{A, B, C, D\}$	$g(A) = AC$	$g(B) = DC$	$g(C) = AB$	$g(D) = DB$
Paper folding	$\{A, B, C, D\}$	$g(A) = AB$	$g(B) = CB$	$g(C) = AD$	$g(D) = CD$

Figura 1.2: Lista de las reglas de sustitución que determinan las secuencias que son usualmente consideradas en el estudio de estructuras aperiódicas.

### 1.5.1 Secuencia Thue-Morse

La secuencia Thue-Morse es, junto con la de Fibonacci, la más extensamente estudiada [25–28]. Se sabe que las redes basadas en esta secuencia tienen una geometría como se ve en la Fig. 1.2, y cuya regla de sustitución es  $g(A)=AB$  y  $g(B)=BA$ . El número de letras en esta secuencia aumenta geométricamente,  $N = 2^n$ , donde  $n$  indica el orden de iteración. En el límite infinito la frecuencia relativa de ambos tipos de letras en la secuencia toma el mismo valor, es decir,  $\nu_A = \nu_B = 1/2$ . Este resultado contrasta con la correspondiente a la secuencia de Fibonacci, donde  $\nu_A = \tau^{-1}$  y  $\nu_B = \tau^{-2}$ , donde  $\tau$  es el número aureo. Otra diferencia importante es que en la secuencia de Fibonacci las letras  $B$  aparecen siempre aisladas, mientras que en la secuencia Thue-Morse aparecen tanto dímeros  $AA$  como  $BB$  por igual.



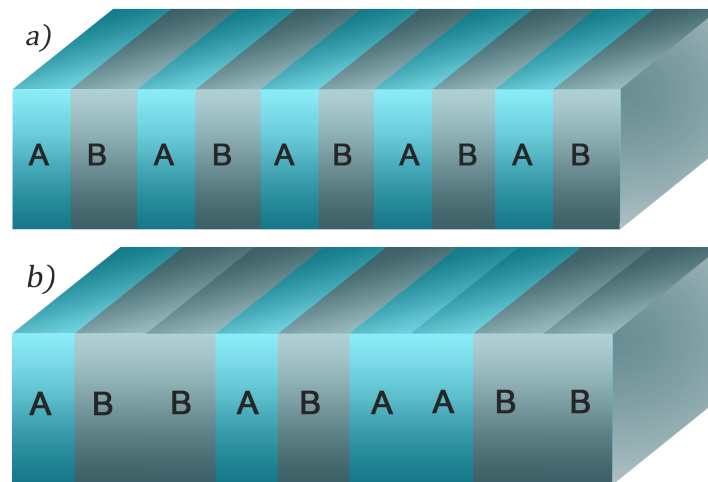


Figura 1.3: Representación esquemática de: a) heteroestructura con orden periódico, y b) heteroestructura formada con un orden cuasiperiódico Thue-Morse.

## 1.6 Heteroestructuras Cuasirregulares

Las heteroestructuras periódicas son definidas como estructuras semiconductoras en la cual la composición química cambia en la dirección de crecimiento, es decir, capas de dos materiales diferentes A y B se alternan de forma periódica Fig.1.3 (a). Éstas han sido la base de los más avanzados dispositivos semiconductores que se han desarrollado y producido. Son elementos esenciales para el desarrollo de fuentes ópticas y detectores, y se han empleado cada vez más en dispositivos de alta velocidad y de alta frecuencia. La utilidad de las heteroestructuras es que ofrecen un control preciso sobre los estados y portadores de carga en los semiconductores debido a sus particulares propiedades entre las cuales destaca la formación de bandas permitidas y prohibidas en el espectro de energía.

Así pues, se puede introducir un orden aperiódico haciendo crecer las capas A y B con diferente periodo de repetición, y que el radio de tal periodo sea irracional, Fig. 1.3 (b). También ha sido mostrado que estas estructuras pueden ser crecidas usando las mismas técnicas que las usadas para cristales regulares [29]. Aquí, las propiedades particulares que caracterizan a las estructuras cuasirregulares son dos. Una, el espectro (que representa qué frecuencias o energías están permitidas o no en estos sistemas) es altamente fragmentado. Es decir, aparecen varias bandas permitidas que se dividen a su vez en varias subbandas, y éstas a su vez en otras subbandas menores, presentado así el espectro ciertos rasgos autosimilares. Por otro lado, el comportamiento de los desplazamientos atómicos o de las funciones de onda para electrones, se encuentra entre el comportamiento extendido, propio de los sistemas periódicos, y el localizado, propio de los sistemas desordenados. Se habla en este caso de estados críticos, caracterizados por fuertes fluctuaciones con características autosimilares. Luego, se pueden usar los dos tipos de ordenamiento como un mecanismo adicional para modular las propiedades fundamentales de estructuras semiconductoras, y consecuentemente expandir sus posibilidades para aplicaciones tecnológicas. Por lo tanto, considerando la importancia de la modulación periódica

y la cuasiperiódica, desde el punto de vista fundamental y tecnológico, parece natural que se pueda aplicar a cualquier nuevo material.

## 1.7 Antecedentes

Gracias a la posibilidad de crecer heteroestructuras regulares y cuasirregulares y al descubrimiento del grafeno, se inició un importante estudio tanto teórico como experimental relacionado con las propiedades de transmisión y transporte de los electrones de Dirac de estas novedosas estructuras [17, 33–40].

En los primeros trabajos [17, 34], se reportan estudios teóricos en sistemas periódicos, donde se muestran las propiedades de transporte de los portadores de carga a través de superredes de grafeno a una y dos capas. También demuestran que la dependencia angular de la probabilidad de transmisión está directamente relacionada con los parámetros de estructura, incluso cuando se presenta tunelamiento Klein.

Además, se ha encontrado que en contraste con la estructura de grafeno a una capa, la transmisión del sistema de grafeno a dos capas presenta propiedades similares a las de una superred semiconductor. Varias dependencias angulares de la probabilidad de transmisión dependen sensiblemente del ancho y altura de las barreras, así como de la anchura y número de pozos. Esto significa, que la conductividad en superredes de grafeno puede ser controlada cambiando los parámetros de la estructura, aunque exista tunelamiento Klein [17, 34].

Se reportan en la literatura los primeros estudios teóricos en sistemas aperiódicos. Particularmente aquellos basados en la secuencia de Fibonacci. Tal es el caso de la modulación aperiódica en sistemas basados en una sola capa de grafeno aplicando la secuencia Fibonacci. También se han estudiado los estados confinados y los espectros de transmisión para un conjunto finito de pozos cuánticos dispuestos de acuerdo a la secuencia de Fibonacci en el grafeno para una sola capa. Igualmente, se obtiene que el solapamiento de las funciones de onda en todo sistema de múltiples pozos, provocando la formación de subbandas, cuyo espectro fractal es más evidente a medida que aumenta el número de generación de Fibonacci. El patrón estructural de autosimilaridad garantiza la existencia de resonancias en todas las escalas, un espectro de energía fractal surge naturalmente entre los efectos de corto y largo alcance de un sistema cuasiperiódico [36].

En este mismo sentido, se ha implementado el método de la matriz de transferencia para calcular la conductividad, a través de una superred grafeno de dos capas de Fibonacci y se han comparado los resultados con los de una estructura de bloque periódico. Cabe mencionar que la transmisión es fuertemente dependiente del ángulo de incidencia de las cuasipartículas. Entonces la conductancia a bajas energías resulta fuertemente modificada por la cuasiperiodicidad del sistema [38].

Se han reportado estudios en sistemas basados en dos capas de grafeno ordenados de acuerdo a la secuencia de Fibonacci. Aquí, los espectros de transmisión están fragmentados y aparecen en grupos, debido a la cuasiperiodicidad del sistema, y la conductividad muestra un carácter oscilatorio junto con algunos picos resonantes similares a los de superredes semiconductoras, en la cual se ha tomado una estructura periódica como refe-

rencia. En este caso, el solapamiento de las funciones de onda a través del sistema causan la formación de minibandas, esto se hace más evidente a medida que el número de pozos aumenta, grandes generaciones de Fibonacci [39].

En particular, para la secuencia de Thue-Morse los trabajos en grafeno son escasos, aunque en los últimos años se han publicado un par de trabajos con resultados trascendentes [40, 41]. En el trabajo de Ma y colaboradores consideran la secuencia Thue-Morse para construir una superred en grafeno. Como resultados encontraron que existe un inusual punto Dirac en ese sistema y su localización es exactamente en la energía correspondiente a el número de onda promediado en cero (zero-k). Además, muestran que el zero-k gap no depende de las constantes de la red. Sin embargo otros gaps y pasabandas con mayor energía sí dependen de los parámetros de la red. También, se encuentra que la posición del zero-k gap es débilmente dependiente del ángulo de incidencia  $\theta_0$ , mientras que otros gaps de Bragg cambian sensiblemente con  $\theta_0$ .

También, calculan la conductancia total  $G$  y el factor Fano  $F$ , las cuales están dadas por  $G = G_0 \int_0^{\pi/2} T \cos \theta_0 d\theta_0$  y  $F = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} T(1 - T) \cos \theta_0 d\theta_0 / \int_{-\pi/2}^{\pi/2} T \cos \theta_0 d\theta_0$ , donde  $T = |t|^2$  y  $G_0 = 2e^2 m v_F L_y / \hbar^2$ , con  $L_y$  denotando la anchura de la banda del grafeno en la dirección  $y$ . Lo que debemos notar es que la curva de la conductancia angular promediada  $G$  alcanza su mínimo en el punto de Dirac y forma un cono lineal alrededor de este, y  $F$  en la ubicación del punto de Dirac alcanza el valor de  $1/3$  aproximadamente. También encontraron que la conductancia y el cambio de factor de Fano con la relación  $\omega_A/\omega_B$  desde la ubicación del DP se basa en esta relación. Por lo tanto, esto indica que la conductancia de la secuencia de GSL TM podría ser modulada por la relación de las constantes de red.

Más recientemente, en 2016 [42], García-Cervantes y colaboradores expusieron la dependencia de el gap principal en el espectro de transmitancia eléctrica con el ángulo de incidencia, en un sistema periódico en grafeno. En éste trabajo, mostraron que a medida que el ángulo crecía la anchura del gap crecía cuadráticamente hasta llegar a un ángulo crítico donde la dependencia pasaba a ser exponencial.

## 1.8 Motivación

Como ya se ha mencionado anteriormente, las estructuras aperiódicas poseen propiedades extraordinarias capaces de modificar las características propias de cualquier material. Es así como el grafeno se ha sometido a este tipo de estudio dejando resultados relevantes en el ámbito tecnológico así como en el teórico. También se habló en específico de la secuencia Thue-Morse, la cual tiene particulares diferencias en comparación con otras secuencias cuasirregulares aplicadas en heteroestructuras. No obstante, el estudio de esta secuencia en materiales bidimensionales es escaso.

Teniendo en cuenta las propiedades de transmisión y transporte que presenta las estructuras cuasirregulares con ordenamiento aperiódico Thue-Morse surge la motivación del presente trabajo.

## 1.9 Objetivos

El objetivo principal en este trabajo es estudiar, analizar y entender las peculiaridades de los sistemas cuasirregulares basados en grafeno. Uno de los objetivos es estudiar teóricamente las propiedades de transmisión y transporte de los electrones de Dirac a través de sistemas multicapas de grafeno siguiendo el ordenamiento de la secuencia de nuestro sistema cuasirregular en cuestión, utilizando como método de cálculo el esquema de la Matriz de Transferencia. Para efectuar dicho estudio, vamos a considerar dos tipos de sistemas: el primero es un sistema de barreras de potencial generado al depositar o crecer grafeno sobre sustratos mixtos formados por  $SiO_2$  y  $SiC$  (Fig. 1.4 (b)), en donde la región del sustrato  $SiO_2$  (región k) no genera brecha prohibida en el espectro del grafeno mientras que en la región del sustrato  $SiC$  (región q) si se genera una brecha prohibida finita. El segundo sistema es un conjunto de barreras de potencial generado al aplicar en regiones intercaladas campo electrostático en dirección perpendicular a la sábana de grafeno (Fig. 1.4 (a)), desplazando los conos de Dirac en las regiones donde se aplica campo electrostático. Para alcanzar los objetivos mencionados, fijaremos los siguientes puntos concretos:

- Determinar las propiedades de transmisión de los electrones de Dirac como función de la energía para los dos casos: sustratos y electrostático. Asimismo, calcular y analizar la distribución angular de la transmitancia en ambos casos. En particular, se analizará bajo qué condiciones se presentan características de autosimilaridad en la transmitancia al variar el ancho de partida de la región q, el número de generación de la secuencia y el ángulo de incidencia, además de ver como esta propiedad se manifiesta en la conductancia.
- Calcular, estudiar y analizar las propiedades de transporte, cómo lo es la conductancia de los electrones de Dirac a través del sistema cuasirregular Thue-Morse. Por otro lado, se determinarán las denominadas gráficas de contorno, con el fin de tener una visión general de la transmitancia en función del ángulo y de la energía. Todos los cálculos son realizados para ambos casos. En particular, se analizará cómo se modifican las propiedades mencionadas al variar el ancho de partida de la región q, el número de generación de la secuencia y el ángulo de incidencia. Se buscará bajo qué condiciones se presentan características de autosimilaridad en la conductancia.
- Cálculo y análisis de los estados acotados de los electrones de Dirac en sistemas multicapas de grafeno que atiendan las reglas de generación de la secuencia Thue-Morse. Comparación de resultados obtenidos para las propiedades de transmisión y transporte tomando en cuenta los dos casos: sustratos y electrostático. Además, se realizará un estudio acerca del tunelamiento o efecto Klein en nuestro sistema de estudio, así como, su impacto en las propiedades de transporte.

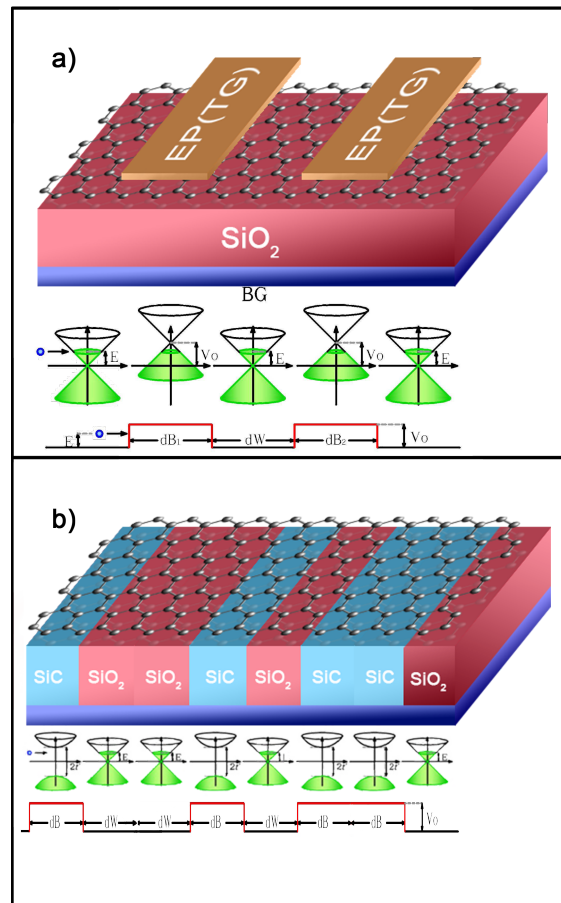


Figura 1.4: Diagrama de la sección transversal, esquema de la relación de dispersión y representación energética del sistema (a) electrostático y (b) sustratos. La estructura electrostática se genera al colocar dos contactos (EP) o puertas (TG) en la sábana de grafeno, la cual es depositada sobre  $SiO_2$  (región roja), produciendo un desplazamiento de los conos de Dirac en las regiones donde se aplica campo electrostático y generando así un arreglo de barreras de potencial de altura  $V_0$ , equivalente al voltaje aplicado. La estructura referente a los sustratos se genera al depositar la sábana de grafeno sobre sustratos mixtos de  $SiO_2$ -SiC, donde la región azul representa al sustrato SiC, dando origen a regiones con y sin brecha prohibida, en esta ocasión la relación de dispersión es parabólica reproduciendo justamente un arreglo de barreras de altura  $t'$ . En ambos casos la puerta inferior (BG) se usa para controlar el nivel de Fermi (límite superior en las regiones verdes de los conos) y el tipo de dopaje (n o p) en los sustratos. La esfera azul representa un electrón de Dirac incidiendo con una energía de Fermi ( $E_F$ ).





## 2. Metodología

Al momento de trabajar con sistemas heteroestructurados nos encontramos con el problema principal que involucra cálculos con un gran número de superficies. Por tanto, es preciso una herramienta que nos facilite esta labor. En el presente capítulo mostraremos el método de la Matriz de Transferencia (MT) [43–45], técnica que es usada con gran éxito en este tipo de sistemas para estudiar las propiedades de transmisión y transporte. El método se puede aplicar a electrones de Dirac salvo las particularidades que estos últimos acarrearán [46,47]. En particular, se resuelve la ecuación de Dirac [48] para los dos sistemas ya planteados: electrostático y sustratos, con sus respectivas relaciones de dispersión de energía y funciones de onda, propias de cada sistema.

También se da a conocer una panorámica de los fenómenos de transporte junto con la fórmula de Landauer-Büttiker [49] empleada para el cálculo de conductancia.

Finalmente, se plantea de manera general el caso de estados acotados con el fin de entender el comportamiento de los electrones de Dirac y las relaciones que éstos tienen con las propiedades de los sistemas cuasirregulares.

### 2.1 Matriz de Transferencia

En la presente sección se muestra el método matemático de la Matriz de Transferencia implementado para el estudio de electrones de Dirac en medios multicapas basados en grafeno [46,47]. Para tener una idea clara del problema a resolver se considera un sistema a capas de grafeno o en otras palabras, un conjunto finito de barreras de potencial (Fig. 2.1), que como se mencionó en el capítulo anterior se puede generar por diferentes mecanismos, para nuestro objeto de estudio consideramos solamente dos de ellos: el caso de sustratos y el caso electrostático.

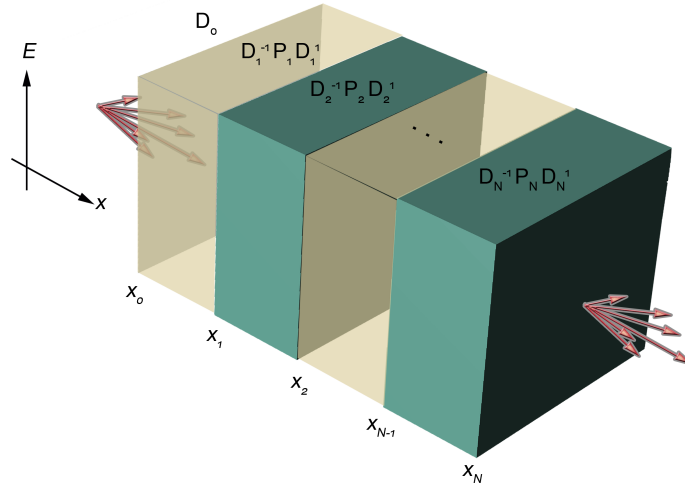


Figura 2.1: Sistema multicapas de grafeno, aquí se muestran las matrices dinámicas y de propagación correspondientes a las diferentes regiones que conforman el sistema.

### 2.1.1 Caso electrostático

En este caso, las barreras son obtenidas aplicando voltaje, potencial electrostático. La principal característica dentro de este caso se encuentra que los electrones de Dirac no presentan masa y la presencia del tunelamiento Klein [14].

Ahora aplicamos el conocimiento que tenemos sobre Matriz de Transferencia. Ésta evalúa la función de onda, y transfiere las amplitudes de una función de onda de un medio a otro. Para esto, hay que identificar dos regiones específicas (ver Fig. 2.2): la región  $k$  con función de onda  $\psi_k$ , y la región  $q$  con función de onda  $\psi_q$ .

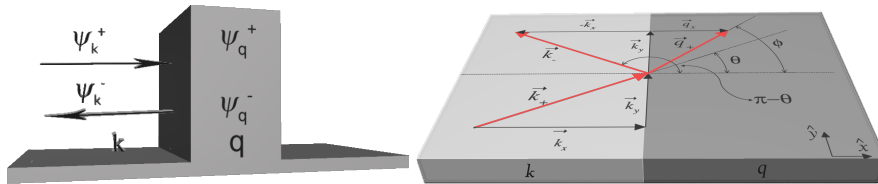


Figura 2.2: (Izquierda) Regiones de interés. (Derecha) Vectores de onda.

Para la región  $k$ , los electrones de Dirac se comportan como partículas relativistas con masa igual a cero, por lo que el Hamiltoniano está dado por

$$H = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}, \quad (2.1)$$

donde  $v_F$  es la velocidad de Fermi dada por  $v_F = 3ta/(2\hbar)$  con  $a$  la distancia carbono-carbono,  $t$  es el factor de medida de interacción de los átomos carbono-carbono en el grafeno, del orden de 2.7 eV. Por tanto, la solución general a la ecuación de Dirac, en la región  $k$ , está dada por la función de onda



$$\psi_k^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ u_\pm \end{pmatrix} e^{\pm ik_x x + ik_y y}, \quad (2.2)$$

con

$$u_\pm = \pm s e^{\pm i\theta}, \quad (2.3)$$

donde  $s = \text{sign}(E)$  y  $\theta = \arctan(k_x/k_y)$ . Luego, el valor propio de la energía correspondiente es

$$E = \pm v_F \hbar \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = \pm \hbar v_F k. \quad (2.4)$$

Para la región  $q$ , el Hamiltoniano para los electrones de Dirac es:

$$H = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + V_0, \quad (2.5)$$

donde  $V_0$  es el potencial electrostático aplicado. Entonces, para la región  $q$  la solución general a la ecuación de Dirac está dada por la función de onda

$$\psi_q^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ v_\pm \end{pmatrix} e^{\pm iq_x x + iq_y y}, \quad (2.6)$$

con

$$v_\pm = \frac{\hbar v_F (\pm q_x - iq_y)}{E - V_0}, \quad (2.7)$$

y la autoenergía asociada a la región  $q$  toma la forma

$$E - V_0 = \pm \hbar v_F q. \quad (2.8)$$

Ahora, podemos establecer para la primera interfaz, ubicada en  $x = x_0 = 0$ , una relación entre la onda incidente  $\psi_k^+$  y reflejada  $\psi_k^-$  en la región  $k$  con la onda transmitida  $\psi_q^+$  y reflejada  $\psi_q^-$  en la región  $q$ , por medio de la condición de continuidad

$$\psi_k^\pm(0) = \psi_q^\pm(0), \quad (2.9)$$

entonces, la ecuación de continuidad tiene la forma

$$A_0 \psi_k^+ + B_0 \psi_k^- = A_1 \psi_q^+ + B_1 \psi_q^-, \quad (2.10)$$

donde las expresiones correspondientes para cada una de estas funciones de onda están dadas por las ecuaciones (2.2) y (2.6), por lo que es posible expresar la ec. (2.10) como:

$$A_0 \begin{pmatrix} 1 \\ u_+ \end{pmatrix} + B_0 \begin{pmatrix} 1 \\ u_- \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} 1 \\ v_+ \end{pmatrix} + B_1 \begin{pmatrix} 1 \\ v_- \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

reescribiendo la última ecuación en forma matricial, obtenemos

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ u_+ & u_- \end{pmatrix}^{-1}}_{D_0^{-1}} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ v_+ & v_- \end{pmatrix}}_{D_1} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = D_0^{-1} D_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

donde  $D_0$  y  $D_1$  son llamadas *matrices dinámicas*, las cuales corresponden al medio inicial y al interior de la barrera, respectivamente.

Para la segunda interfaz ubicada en  $x = x_1$ , se cumple la condición de continuidad

$$\psi_q^\pm(x_1) = \psi_k^\pm(x_1), \quad (2.14)$$

por lo que la ecuación de continuidad es

$$A_1 \psi_q^+ + B_1 \psi_q^- = A_2 \psi_k^+ + B_2 \psi_k^-, \quad (2.15)$$

escribiendo ésta última en términos de las soluciones dadas por las ecuaciones (2.2) y (2.6) como

$$A_1 \begin{pmatrix} 1 \\ v_+ \end{pmatrix} e^{iqx_1} + B_1 \begin{pmatrix} 1 \\ v_- \end{pmatrix} e^{-iqx_1} = A_2 \begin{pmatrix} 1 \\ u_+ \end{pmatrix} e^{ikx_1} + B_2 \begin{pmatrix} 1 \\ u_- \end{pmatrix} e^{-ikx_1}, \quad (2.16)$$

en forma matricial resulta

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{iqx_1} & e^{-iqx_1} \\ v_+ e^{iqx_1} & v_- e^{-iqx_1} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} e^{ikx_1} & e^{-ikx_1} \\ u_+ e^{ikx_1} & u_- e^{-ikx_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

y como

$$\begin{pmatrix} e^{iqx_1} & e^{-iqx_1} \\ v_+ e^{iqx_1} & v_- e^{-iqx_1} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} e^{-iqx_1} & 0 \\ 0 & e^{iqx_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ v_+ & v_- \end{pmatrix}^{-1}, \quad (2.18)$$

entonces resulta

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} e^{-iqx_1} & 0 \\ 0 & e^{iqx_1} \end{pmatrix}}_{P_1} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ v_+ & v_- \end{pmatrix}^{-1}}_{D_1^{-1}} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ u_+ & u_- \end{pmatrix}}_{D_0} \begin{pmatrix} e^{ikx_1} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = P_1 D_1^{-1} D_0 \begin{pmatrix} e^{ikx_1} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

con  $P_1$  denominada *matriz de propagación*, que representa la propagación de los electrones de Dirac a través de la barrera de ancho  $x_1$ .

Extendiendo el caso para un arreglo de barreras de potencial, el cual puede ser tratado como un sistema multicapas formado por  $N$  capas y aplicando este procedimiento para todas las interfaces tomando en cuenta las condiciones de continuidad para las funciones de onda correspondientes a la región  $k$  y  $q$ , resulta que podemos escribir las amplitudes  $A_0, B_0$  en términos de  $A_N, B_N$  mediante la expresión

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = D_0^{-1} \left[ \prod_{l=1}^N D_l P_l D_l^{-1} \right] D_0 \begin{pmatrix} A_N \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

donde las matrices  $D_l$ 's y  $P_l$ 's son las matrices dinámicas y de propagación, respectivamente, de cada una de las regiones que componen el sistema multicapas, definidas por

$$D_l = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ u_+ & u_- \end{pmatrix} & \text{para la región } k, \\ \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ v_+ & v_- \end{pmatrix} & \text{para la región } q, \end{cases} \quad l = 0, 1, 2, \dots, N, \quad (2.21)$$

con  $u_{\pm}$  y  $v_{\pm}$  definidas en términos de las ecuaciones (2.3) y (2.7), respectivamente. Y las matrices de propagación toman la forma

$$P_l = \begin{cases} \begin{pmatrix} e^{-ik(x_{l+1}-x_l)} & 0 \\ 0 & e^{ik(x_{l+1}-x_l)} \end{pmatrix} & \text{para la región } k, \\ \begin{pmatrix} e^{-iq(x_{l+1}-x_l)} & 0 \\ 0 & e^{iq(x_{l+1}-x_l)} \end{pmatrix} & \text{para la región } q, \end{cases} \quad l = 0, 1, 2, \dots, N, \quad (2.22)$$

Definiendo la matriz de transferencia  $M$  como

$$M = D_0^{-1} \left[ \prod_{l=1}^N D_l P_l D_l^{-1} \right] D_0, \quad (2.23)$$

Entonces

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_N \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Por tanto, la transmitancia de los electrones de Dirac a través del sistema multicapas estará dada en función del elemento matricial  $M_{11}$ ,

$$T = \frac{1}{|M_{11}|^2}. \quad (2.25)$$

### 2.1.2 Caso sustratos

Dentro de las particularidades se tiene el caso masivo en el cual se encuentra la presencia de barreras tanto para electrones como huecos, resultando entre otras cosas, la eliminación del efecto Klein [14]. Tomando en cuenta la región  $q$ , el Hamiltoniano para los electrones de Dirac que ahora poseen masa es

$$H = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + t' \sigma_z, \quad (2.26)$$

donde  $t' = mv_F^2$ , con  $m$  la masa efectiva, como resultado de la apertura de la brecha prohibida en el espectro de grafeno de valor  $2t'$  (para todos nuestros calculos numéricos  $t' = 0.13$  eV). Entonces, para la región  $q$  la solución general a la ecuación de Dirac está dada por la función de onda

$$\psi_q^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ v_\pm \end{pmatrix} e^{\pm iq_x x + iq_y y}, \quad (2.27)$$

con

$$v_\pm = \frac{E - t'}{\hbar v_F (\pm q_x - iq_y)}, \quad (2.28)$$

Y la autoenergía asociada a la región  $q$  toma la forma

$$E = \pm \sqrt{(q_x^2 + q_y^2) (\hbar v_F)^2 + t'^2}. \quad (2.29)$$

Entonces podemos suponer nuevamente un sistema multicapas de grafeno como el de la Fig. 2.1. En la primer interfaz se debe cumplir la continuidad de la siguiente manera:

$$A_0 \psi_k^+ + B_0 \psi_k^- = A_1 \psi_q^+ + B_1 \psi_q^-, \quad (2.30)$$

donde  $\psi_k^\pm$  y  $\psi_q^\pm$  son la onda incidente y reflejada en la región  $k$  y  $q$ , respectivamente, Fig. 2.2 b. Las funciones de onda están dadas por las ecuaciones (2.2) y (2.6). Siguiendo los mismos pasos que en caso de sustratos podemos llegar a la transmitancia:

$$T = \frac{1}{|M_{11}|^2}. \quad (2.31)$$

Matemáticamente el método es el mismo para los dos casos, lo único que cambia es la relación de dispersión y los valores de  $v_\pm$  en la función de onda [46].

## 2.2 Transporte eléctrico

### 2.2.1 Resistencia eléctrica

Es bien conocido que en sistemas macroscópicos en dos dimensiones la conductancia posee un carácter óhmico, por ejemplo en una placa rectangular

$$G = \sigma \frac{W}{L}, \quad (2.32)$$

donde  $\sigma$  es la conductividad del metal (independiente de la muestra),  $W$  el ancho del conductor o dimensión transversal y  $L$  es su longitud.

La física de un conductor se caracteriza principalmente por la longitud de Fermi de los electrones, el camino libre medio que recorren los electrones antes de colisionar y perder su momento  $k$ , y la longitud de relajación de fase que es el camino que recorren antes de perder su fase inicial.

### 2.2.2 Longitud de onda de Fermi

$$\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F} = \sqrt{\frac{2\pi}{n_s}} \quad (2.33)$$

Para una densidad de  $5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$  la longitud de onda de Fermi  $\lambda_F \approx 35 \text{nm}$ . A bajas temperaturas a la corriente sólo contribuyen los electrones próximos a la superficie de Fermi por lo cual la longitud de onda de Fermi es la longitud relevante de los electrones que participan en la corriente.

### 2.2.3 Camino libre medio

Un electrón en un cristal experimenta colisiones con impurezas, vibraciones de la red (fonones), u otros electrones, y a consecuencia de tales colisiones su momento cambia. El tiempo de relajación de momentos  $\tau_m$  está relacionado con el tiempo medio entre colisiones  $\tau_c$  como

$$\frac{1}{\tau_m} = \alpha_m \sqrt{\frac{1}{\tau_c}}, \quad (2.34)$$

donde  $0 < \alpha_m < 1$  denota la efectividad de la colisión para cambiar el momento  $k$ . El camino libre medio es la distancia que el electrón viaja antes de que su momento cambie, o sea

$$L_m = v_F \tau_m, \quad (2.35)$$

donde  $v_F$  es la velocidad de Fermi. ( $v_F = 3 \times 10^7 \text{cm/s}$  si  $n_s = 5 \times 10^{11} / \text{cm}^{-2}$ .)

### 2.2.4 Longitud de relajación de fase

En principio, los electrones en un conductor están descritos por una función de onda compleja la cual está entonces caracterizada por una fase. Al colisionar los electrones con impurezas dinámicas como fonones (las estáticas son irrelevantes ya que conducen a una diferencia de fase definida) entonces esa fase se vuelve aleatoria (se "randomiza"). Otras fuentes de alteración random de la fase son las que se producen con la colisión entre electrones y con impurezas con grados de libertad internos que permiten a éstas cambiar su estado. El tiempo de relajación de fase se define como el tiempo después del cual la dispersión de fase es aproximadamente 1, esto es,

$$\Delta\varphi \sim (\Delta\epsilon)\tau_\varphi/\hbar \sim 1 \longrightarrow \tau_\varphi \sim (\tau_c/\omega^2)^{1/3}, \quad (2.36)$$

donde hemos considerado la interacción con fonones  $(\Delta\varepsilon)^2 = (\hbar\omega)^2(\tau_\phi/\tau_c)$  siendo  $\hbar\omega$  la frecuencia del fonón, esto nos indica que los fonones de baja frecuencia son menos efectivos para cambiar la fase. La longitud de relajación de fase se define entonces como

$$L_\phi = v_F \tau_\phi. \quad (2.37)$$

Esto es válido si  $\tau_\phi \sim \tau_m$ , como es el caso de los semiconductores de alta movilidad. Por el contrario en semiconductores de baja movilidad,  $\tau_\phi \gg \tau_m$ , la trayectoria sobre un intervalo  $\tau_\phi$  se puede pensar como una suma de  $(\tau_\phi/\tau_m)$  trayectorias coherentes de momento, cada una de longitud  $v_F \tau_m$  en direcciones aleatorias. Se puede demostrar en este caso que

$$L_\phi^2 = D\tau_\phi, \quad (2.38)$$

donde  $D = v_F^2 \tau_m/2$  es el coeficiente de difusión del metal. Definimos a un sistema como mesoscópico cuando sus dimensiones son mayores que las de un átomo pero no suficientemente grandes como para que la conductancia  $G$  obedezca a una ley óhmica. En el caso más simple de transporte en sistemas mesoscópicos el electrón viaja sin colisionar. Este transporte se denomina transporte balístico. Es decir que el electrón atraviesa la parte activa sin perder energía y la única resistencia es la que existe en la interface. Si reducimos suficientemente las dimensiones de la muestra hasta la escala mesoscópica el comportamiento óhmico de  $G$  deja de ser válido. A medida que el tamaño del sistema se reduce aparecen dos correcciones:

- Aparece una resistencia en la separación del conductor con el medio exterior, en adelante "interface".
- $G$  no decrece continuamente con  $W$ .

Finalmente podemos clasificar diferentes regímenes de transporte según la longitudes que hemos visto como:

- Difusivo
  - $\rightsquigarrow \lambda_F \quad l_m, l_\phi < L.$
- Balístico
  - $\rightsquigarrow \lambda_F < L < l_m, l_\phi$  clásico.
  - $\rightsquigarrow \lambda_F, L < l_m, l_\phi$  cuántico.

## 2.3 Formalismo de Landauer

Ahora describiremos un método que permite describir el transporte en régimen de respuesta lineal en sistemas nanoscópicos en términos de probabilidades de transmisión.

### 2.3.1 Resistencia de un conductor balístico

En esta subsección consideramos un conductor balístico en una región donde existe un campo eléctrico. Siendo el conductor balístico (Fig. 2.3), la resistencia que estará presente en el transporte será resistencia de contacto. En los contactos la corriente viaja por un gran número de modos, sin embargo en la parte activa lo hace sólo por un reducido

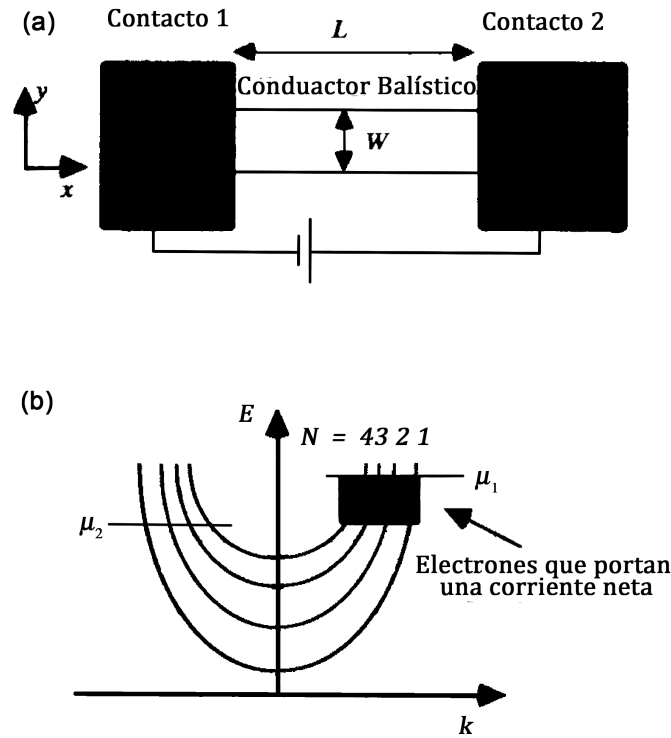


Figura 2.3: (a) Sistema conformado por un conductor balístico y conectado a dos contactos no reflectivos, bajo la acción de un potencial externo. (b) Relaciones de dispersión para diferentes modos transversales o subbandas pertenecientes al conductor,  $\mu_1$  representa el cuasi-nivel de Fermi para los estados  $+k$  mientras que  $\mu_2$  representa los estados  $-k$ . Las diferentes subbandas son indicadas por  $N$ .

número de éstos. Así en la interface existe una redistribución de cargas entre los diferentes modos que produce resistencia. El transporte inverso desde la parte activa hacia los contactos, se produce sin resistencia (conductor delgado hacia conductor grande), en este sentido denominamos a los contactos como ‘no-reflectivos’. Esto se traduce por ejemplo en que estados en la parte activa  $+k$  corresponderán a electrones que provienen desde el contacto izquierdo únicamente ya que no van a existir reflexiones internas. En el conductor delgado existen varios modos transversales o subbandas cada uno de los cuales posee una cota inferior en energía dada por

$$\varepsilon_\alpha = E_\alpha(k=0). \quad (2.39)$$

La corriente en cada modo no se puede propagar en energías menores que sean cota inferior. Entonces, el número de modos transversales a una energía  $E$  es igual al número de modos con cotas menores que  $E$ , o sea

$$M(E) = \sum_{\alpha} \Theta(E - \varepsilon_{\alpha}). \quad (2.40)$$

La corriente transportada será la suma de la corriente en cada modo. Por esto consideremos un único modo transversal cuyos estados  $+k$  están ocupados distribuidos según una función  $f^+(E)$ . Un gas de electrones con  $n$  electrones por unidad de longitud moviéndose con velocidad  $v$  transporta una corriente igual a  $E_v$ . Entonces si la densidad de electrones asociada a un único estado  $k$  en un modo de un conductor de longitud  $L$  es  $1/L$ , la corriente transportada por los todos los estados  $+k$  sería:

$$I^+ = \frac{e}{L} \sum_k v f^+(E) = \frac{e}{L} \sum_k \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} f^+(E), \quad (2.41)$$

pasando a una integral para una distribución continua de estados (factor 2 por el spin)

$$I^+ = \frac{2e}{h} \int_{\varepsilon}^{\infty} f^+(E) dE, \quad (2.42)$$

donde  $\varepsilon$  es la cota inferior del modo. Esta expresión se puede extender al caso de muchos modos

$$I^+ = \frac{2e}{h} \int_{\varepsilon}^{\infty} M(E) f^+(E) dE. \quad (2.43)$$

### 2.3.2 Resistencia de contacto

Analicemos el sistema que se observa en la Fig. 2.4. Hemos visto que cuando disminuimos suficientemente el tamaño de la parte activa y el conductor es balístico  $G$  posee un máximo finito. Como el conductor es balístico debemos determinar el origen de la resistencia que se observa. Consideremos los contactos con potenciales  $\mu_1$  y  $\mu_2$ , y con las hipótesis fundamentales que hemos visto:

- Contactos: densidad infinita de niveles.
- No hay reflexión para los electrones entrando a un contacto desde el conductor.
- A temperatura cero.

Suponiendo que el número de modos es constante en el rango de energías  $\mu_1 > E > \mu_2$  podemos escribir

$$I^+ = \frac{2e^2}{h} M \frac{(\mu_1 - \mu_2)}{e}, \quad (2.44)$$

de donde la conductancia de contacto  $G_c$  resulta

$$G_c = \frac{2e^2}{h} M, \quad (2.45)$$

y por lo tanto la resistencia de contacto

$$G_c^{-1} = 12.9 \frac{k\Omega}{M}. \quad (2.46)$$

Notemos que la resistencia de contacto disminuye cuanto más modos existan en el conductor. En conductores macroscópicos existen miles de modos y por lo tanto la resistencia de contacto es despreciable. Podemos visualizar que la resistencia proviene de los



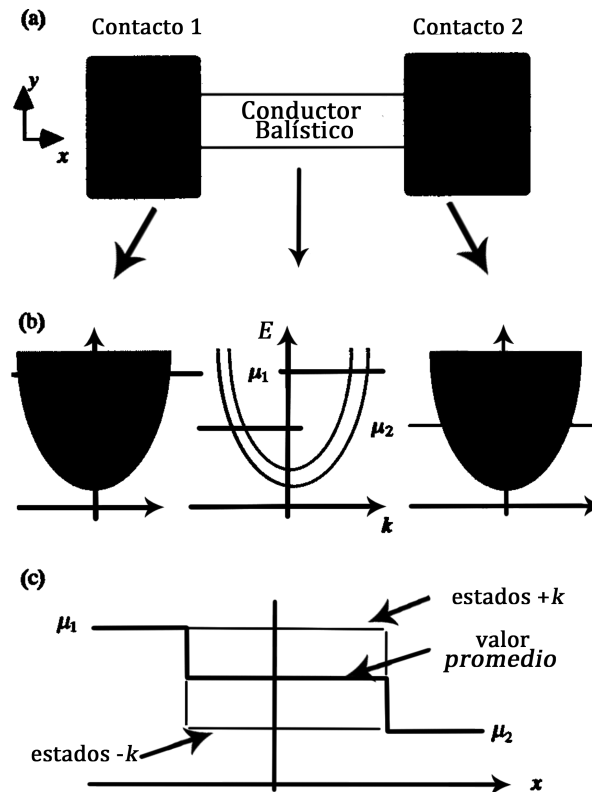


Figura 2.4: (a) Diagrama representativo de un conductor balístico y dos grandes contactos. (b) Densidad de estados para los contactos, los cuales tienen un alto número de modos (área sombreada) tal que los cuasi-niveles de Fermi son casi iguales, por el contrario, el conductor tiene pocos modos de forma tal que los cuasi-niveles de Fermi son distintos. (c) Variación del potencial electroquímico entre los dos contactos.

contactos considerando un esquema de la variación del potencial químico a través del conductor. Dentro de cada contacto la DOS es tan alta que los niveles para  $+k$  y  $-k$  son iguales aún cuando fluya una corriente.

Pero dentro del conductor balístico los niveles son pocos y los cuasi-niveles de Fermi para los estados  $+k$  y  $-k$  son notablemente diferentes. Como se observa en la Fig. 2.4 los estados  $+k$  siguen al potencial  $\mu_1$  y los  $-k$  a  $\mu_2$ . Dentro del conductor el nivel quasi-Fermi promedio permanece constante. Dado que la resistencia esta asociada con la caída de potencial podemos observar que existe resistencia en cada interfase contacto-conductor.

### 2.3.3 Fórmula de Landauer

Consideremos los contactos con potenciales  $\mu_1$  y  $\mu_2$ , y con las hipótesis fundamentales que hemos visto

- Contactos: densidad infinita de niveles.
- Leads: conductores balísticos con  $M$  modos.

- $T$ : probabilidad media de que un electrón que se inyecta en el lead L se transmita al lead R.
- No hay reflexión para los electrones entrando a un contacto desde el conductor.
- A temperatura cero.

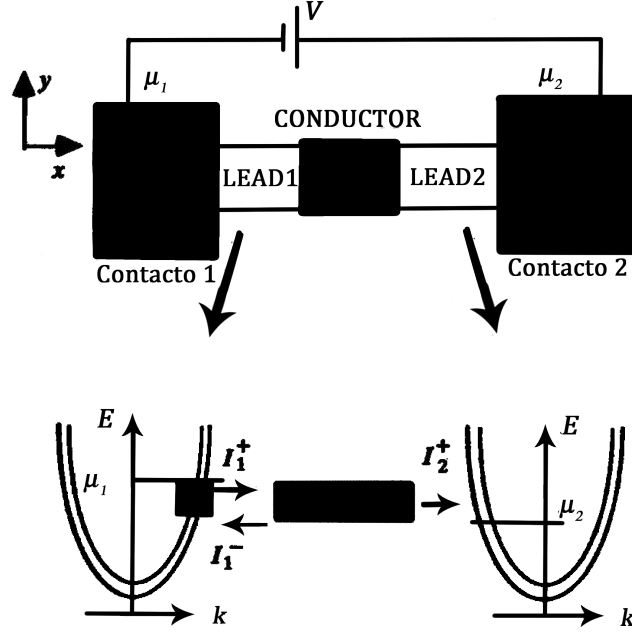


Figura 2.5: Arriba. Representación de la probabilidad de transmisión  $T$  propia de un conductor conectado a dos grandes contactos no reflectivos por medio de dos conductores balísticos, asignados como 'lead1' y 'lead 2'. Abajo. Esquema del flujo de corriente a través del conductor,  $I_1^+$ ,  $I_1^-$  y  $I_2^+$  representan la corriente saliente del Lead 1, la reflejada del Lead 1 y la transmitida por el Lead 2, respectivamente.

Consideremos el sistema de la Fig. 2.5 donde  $T$  es la probabilidad de que un electrón que ingresa al conductor desde el contacto 1 sea transmitido hacia 2. En temperatura cero la corriente que fluye vendrá dada por

$$I_1^+ = \frac{2e}{h} M(\mu_1 - \mu_2), \quad (2.47)$$

$$I_2^+ = \frac{2e}{h} MT(\mu_1 - \mu_2), \quad (2.48)$$

$$I_1^- = \frac{2e}{h} M(1 - T)(\mu_1 - \mu_2), \quad (2.49)$$

$$I = I_1^+ - I_1^- = \frac{2e}{h} MT(\mu_1 - \mu_2), \quad (2.50)$$

con lo cual la conductancia resulta

$$G = \frac{I}{(\mu_1 - \mu_2)/|e|} = \frac{2e^2}{h}MT. \quad (2.51)$$

La ecuación anterior se conoce como fórmula de Landauer. Debemos notar que en el límite de transporte balístico  $T = 1$  y la fórmula da el máximo de conductancia con la resistencia que proviene los contactos. La conductancia que hemos calculado es la que se observa midiendo entre los puntos 1 y 2 dentro de cada contacto e incluye la resistencia de contacto. Si calculamos la resistencia entre los puntos  $1L$  y  $2L$  dentro del conductor balístico obtenemos ( $T = 1$ )  $\frac{2e^2}{h}M$ , donde  $M$  es el número de modos. Si además consideramos al conductor con una probabilidad de transmisión  $T$  obtenemos la fórmula de Landauer. Esto es, evaluando la conductancia entre  $1L$  y  $2L$  obtenemos la correspondiente a los puntos 1 y 2. Esto resulta así ya que la corriente en cualquier conductor está dada por

$$I = \frac{2e}{h}M(F^+ - F^-). \quad (2.52)$$

Dentro del contacto  $M$  es un número muy grande que se aproxima a infinito y por lo tanto  $F^+ = F^-$ . En la parte activa en cambio, existen pocos modos y la diferencia entre  $F^+$  y  $F^-$  no puede ser despreciada. Además la distribución de energía de los electrones que ingresan en el conductor están en equilibrio termodinámico con los electrones de los contactos y por lo tanto el cálculo de  $G$  entre  $1L$  y  $2L$  nos da el resultado correcto entre 1 y 2. Recordemos que en el capítulo anterior habíamos visto que no era posible recuperar la ley de Ohm considerando únicamente transporte balístico. Veamos ahora que la fórmula de Landauer sí nos conduce a la ley de Ohm. Para esto consideremos  $N$  conductores en serie, pero en este caso cada uno de ellos con probabilidad  $T_i$  de transmitir un electrón. Es fácil de probar que la probabilidad total de transmisión del sistema puede escribirse como

$$\frac{1 - T_N}{T_N} = N \frac{1 - T}{T}, \quad (2.53)$$

donde hemos supuesto que  $T = T_1 = T_2 = \dots = T_n$ . Por lo tanto

$$T_N = \frac{T}{N(1 - T) + T}. \quad (2.54)$$

El número de conductores con transmisión  $T$  dentro de un conductor de longitud  $L$  puede escribirse como  $\nu L$  donde  $\nu$  es la densidad de pequeños conductores. Entonces podemos escribir

$$T(L) = \frac{L_0}{L + L_0} \quad L_0 = \frac{T}{\nu(1 - T)}, \quad (2.55)$$

donde  $L_0$  es una longitud característica del orden del camino libre medio (la longitud que el electrón viaja sin colisionar). Dado que para cada centro de colisión individual la probabilidad de reflejar un electrón es  $1 - T$  tenemos (asumiendo  $T \approx 1$ )

$$(1 - T)\nu L_m \approx 1 \longrightarrow L_m \approx L_0 \approx \frac{1}{\nu(1 - T)}. \quad (2.56)$$

Entonces al incluir el factor  $T$  obtenemos la dependencia  $L^{-1}$  que nos faltaba para recuperar la ec. (2.32).

### 2.3.4 Conductancia a temperatura finita y a voltaje finito

Hasta aquí hemos utilizado la hipótesis fundamental de tomar temperatura nula, con lo cual el transporte sólo podía ocurrir desde el contacto 1 ( $\mu_1$ ) al 2 ( $\mu_2$ ) y además hemos supuesto que la corriente circulaba por un único nivel de energía en torno a la superficie de Fermi. En el caso más general el transporte ocurre a través de múltiples niveles en un rango de energías que depende de la temperatura

$$\mu_1 + k_B T > E > \mu_2 - k_B T, \quad (2.57)$$

y tanto el número de modos como el coeficiente de transmisión serán dependientes de la energía. Por lo tanto podemos definir una función de transmisión  $\bar{T}(E) = M(E)T(E)$ . Sean  $f_1(E)$  y  $f_2(E)$  distribuciones de energías en los contactos en temperatura finita, entonces la corriente en el conductor será

$$I = I_1 - I_2 = \int \frac{2e}{h} \bar{T}(E) [f_1(E) - f_2(E)] dE, \quad (2.58)$$

donde hemos supuesto que  $\bar{T}(E) = \bar{T}'(E)$ , es decir que la probabilidad de transmisión de 1 a 2 es igual a la probabilidad de transmisión de 2 a 1. Esto no necesariamente es lo que ocurre en la realidad, y el caso en que no se cumpla se analizará más adelante.

#### Régimen de respuesta lineal

Cuando los contactos están a un mismo potencial  $\mu_1 = \mu_2$  las distribuciones resultan  $f_1(E) = f_2(E)$  por lo que, como es de esperar, la corriente en el conductor es nula. Para pequeñas desviaciones en torno al equilibrio, la corriente es proporcional al potencial aplicado

$$\delta I = \int \frac{2e}{h} (T(E)|_{\text{eq}} \delta[f_1 - f_2] + [f_1 - f_2]_{\text{eq}} \delta T(E)) dE. \quad (2.59)$$

El segundo término es nulo  $[f_1 - f_2]_{\text{eq}} = 0$ , y podemos aproximar el primer término mediante

$$\delta[f_1 - f_2] = [\mu_1 - \mu_2] \left( \frac{\partial f}{\partial \mu} \right)_{\text{eq}} = \left( \frac{-\partial f_0}{\partial E} \right) [\mu_1 - \mu_2], \quad (2.60)$$

donde  $f_0$  es la función de distribución de Fermi de energía. Entonces reemplazando, a partir de la ec. (2.59) obtenemos la fórmula de respuesta lineal en temperaturas finitas

$$G = e \frac{\delta I}{\mu_1 - \mu_2} = \frac{2e^2}{h} \int T(E) \left( \frac{-\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (2.61)$$

En bajas temperaturas aproximamos

$$f_0 E \approx \theta(E_F - E) \Rightarrow -\frac{\partial f_0}{\partial E} \approx \delta(E_F - E) \quad (2.62)$$

Reemplazando en (2.61) obtenemos la fórmula de respuesta lineal a temperatura cero que es la fórmula de Landauer

$$G = \frac{2e^2}{h} \bar{T}(E_F). \quad (2.63)$$

Debemos destacar que el régimen de respuesta lineal es una propiedad de equilibrio. Nos preguntamos cuando vamos a estar en régimen de respuesta lineal. A partir de la derivación anterior pareciera que esto es así cuando  $\mu_1 - \mu_2 \ll k_B T$  para que la aproximación de Taylor utilizada sobre las funciones de distribución resulte precisa. Sin embargo esta es una condición suficiente pero no necesaria, si fuera necesaria no habría respuesta lineal en temperatura cero. En realidad la respuesta lineal se produce, independientemente de la temperatura, cuando la función de transmisión  $\bar{T}(E)$  es aproximadamente constante sobre el rango de energías donde ocurre el transporte y su magnitud es independiente del potencial aplicado. Bajo estas consideraciones podemos escribir la ec. (2.58) como

$$I = \frac{2e}{h} \bar{T}(E) \int [f_1(E) - f_2(E)] dE. \quad (2.64)$$

Además en bajas temperaturas se cumple

$$\mu_1 - \mu_2 = \int [f_1(E) - f_2(E)] dE, \quad (2.65)$$

dado que las funciones  $f_1$  y  $f_2$  son deltas centradas en  $\mu_1$  y  $\mu_2$  en bajas temperaturas. Este resultado es válido también cualquiera sea la temperatura aunque su derivación no es sencilla. Así obtenemos una relación lineal entre la corriente y el potencial aplicado

$$I = \frac{2e}{h} \bar{T}(E) [\mu_1 - \mu_2]. \quad (2.66)$$

Podemos derivar un criterio general para determinar bajo que circunstancias existirá respuesta lineal. Reescribamos la ec. (2.58) en la forma

$$I = \frac{1}{e} \int_{\mu_1}^{\mu_2} G(E') dE', \quad (2.67)$$

donde la función conductancia se define como

$$G(E') = \frac{2e^2}{h} \int \bar{T}(E) F_T(E - E') dE, \quad (2.68)$$

siendo  $F(E')$  una función de distribución térmica

$$F_T(E) = -\frac{d}{dE} \left( \frac{1}{\exp(E/k_B T) + 1} \right) = \frac{1}{4k_B T} \operatorname{sech}^2 \left( \frac{E}{2k_B T} \right). \quad (2.69)$$

La corriente va a responder linealmente al potencial aplicado cuando  $\bar{G}(E')$  sea independiente de la energía en el rango  $\mu_1 < E < \mu_2$ . En este caso podemos escribir

$$I = \bar{G}(E_F) \frac{\mu_1 - \mu_2}{e}, \quad (2.70)$$

donde la conductancia esta evaluada en la energía de Fermi

$$G = \bar{G}(E_F) = \frac{2e^2}{h} \int \bar{T}(E) F_T(E - E_F) dE = \quad (2.71)$$

$$= \frac{2e^2}{h} \int \bar{T}(E) \left[ -\frac{d}{dE} \left( \frac{1}{\exp(E - E_F/k_B T) + 1} \right) \right] dE. \quad (2.72)$$



Figura 2.6: Esquema de variación de  $\bar{T}(E)$  a bajas temperaturas.

A bajas temperaturas, el tiempo de relajación de fases es grande y pueden ocurrir, debido a interferencia cuántica, resonancias en la transmisión, cuando existan múltiples centros de colisiones. Por esta razón  $\bar{T}(E)$  con frecuencia cambia pronunciadamente con la energía. Un esquema de esta variación se muestra en la Fig. 2.6. Definimos correlación de energía como el intervalo de energías en el cual  $\bar{T}(E)$  es invariante. En el ejemplo del caso de la Fig. 2.6 la correlación de energía es pequeña y se puede estimar aproximadamente como

$$\varepsilon_c = \frac{\hbar}{\tau_\phi} \rightarrow 0.006 \text{ meV si } \tau_\phi = 100 \text{ ps.} \quad (2.73)$$

Si estamos en temperatura cero  $F_T$  es una delta y la respuesta lineal ocurrirá únicamente si el potencial aplicado es menor que la energía de correlación (donde  $\bar{T}$  no cambia). El efecto de la temperatura es suavizar la función delta y darle un cierto ancho lo que produce una función  $\bar{G}$  con variación suave en la escala de la energía térmica  $k_B T$ , así la respuesta es lineal mientras el potencial sea menor a  $k_B T$ . En resumen el criterio para respuesta lineal en sistemas con pequeña energía de correlación es que  $\mu_1 - \mu_2 \ll k_B T$ . Pero si la energía de correlación es grande, entonces  $\bar{T}$  será suave, por lo que también la respuesta será lineal para valores mayores de voltajes aplicados. Estos criterios pueden aunarse en una simple fórmula generalizada que nos dice que la respuesta será lineal cuando la función de transmisión sea constante en el intervalo

$$\mu_1 - \mu_2 \ll k_B T + \varepsilon_c. \quad (2.74)$$

Debemos remarcar que si el voltaje es incrementado lo suficiente la función de transmisión puede cambiar y para ser precisos debemos escribir  $\bar{T} = \bar{T}(E, \mu_1, \mu_2)$  y las derivaciones anteriores resultan limitadas a voltajes aplicados no demasiado grandes.

### 2.3.5 Conductancia en sistemas de grafeno

Extendiendo el formalismo anterior desarrollado para dos terminales (denominados 'Lead 1' y 'Lead 2') a sistemas formados por múltiples terminales etiquetadas con el índice  $p$  y  $q$ , es posible expresar la corriente como,

$$I_p = \int i_p(E) dE, \quad (2.75)$$

con  $i_p(E)$  dada por,

$$i_p(E) = \frac{2e}{h} \sum_q [\bar{T}_{qp}(E) f_p(E) - \bar{T}_{pq}(E) f_q(E)], \quad (2.76)$$

donde  $\bar{T}_{pq}$  es la función de transmisión total de la terminal  $q$  a la terminal  $p$  a una energía  $E$  y  $f_p(E)$  es la función de Fermi propia de la terminal  $p$ ,

$$f_p(E) = \left[ \exp\left(\frac{E\mu_p}{k_B T}\right) \right]^{-1}. \quad (2.77)$$

Una vez más, asumiendo que en estado de equilibrio la corriente a través del sistema es nula, resulta que las funciones de transmisión obedecen la relación,

$$\sum_q \bar{T}_{qp}(E) = \sum_q \bar{T}_{pq}(E), \quad (2.78)$$

esta expresión también es del todo aplicable a sistemas fuera del equilibrio siempre y cuando los procesos sean elásticos. Por tanto, la expresión para la corriente es,

$$i_p(E) = \frac{2e}{h} \sum_q \bar{T}_{pq}(E) [f_p(E) - f_q(E)]. \quad (2.79)$$

De la misma manera que en el caso de las dos terminales si el potencial es pequeño tal que  $((\mu_1 - \mu_2) \ll k_B T + \epsilon_c)$  al linealizar la ecuación anterior se obtiene,

$$I_p = \sum_q G_{pq} [V_p - V_q], \quad (2.80)$$

con  $G_{pq}$  la conductancia de la terminal  $q$  a la terminal  $p$ ,

$$G_{pq} = \frac{2e^2}{h} \int \bar{T}_{pq}(E) \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE, \quad (2.81)$$

la expresión anterior es conocida como fórmula de Landauer-Büttiker. Además, a bajas temperaturas resulta,

$$G_{pq} = \frac{2e^2}{h} \bar{T}_{pq}(E_F). \quad (2.82)$$

En términos generales, la teoría de Landauer-Büttiker establece un marco riguroso para la descripción del transporte electrónico en sistemas mesoscópicos siempre y cuando el transporte a través del conductor sea coherente, es decir, que el tamaño del conductor sea mucho menor que la longitud de relajación de fase. De modo que existe una herramienta útil denominada función de transmisión, por medio de la cual se puede describir el flujo de corriente a través del conductor.

Empleando y ajustando la fórmula de Landauer-Büttiker para el caso del grafeno [50], resulta que la conductancia en el régimen lineal toma la forma,

$$G/G_0 = E_F^* \int_{\pi/2}^{\pi/2} T(E_F^*, \theta) \cos \theta d\theta, \quad (2.83)$$

donde  $E_F^* = E_F/E_0$  es la energía de Fermi adimensional con  $E_0 = V_0 = t'$ ,  $G_0 = 2e^2 L_y E_0 / h^2 v_F$  es el factor de conductancia fundamental con  $L_y$  el ancho del sistema en la coordenada transversal  $y$  y  $\theta$  es el ángulo de incidencia de los electrones con respecto a la coordenada  $x$ .

Estos y otros detalles sobre el transporte electrónico se pueden ver en el libro [49].

## 2.4 Estados Acotados

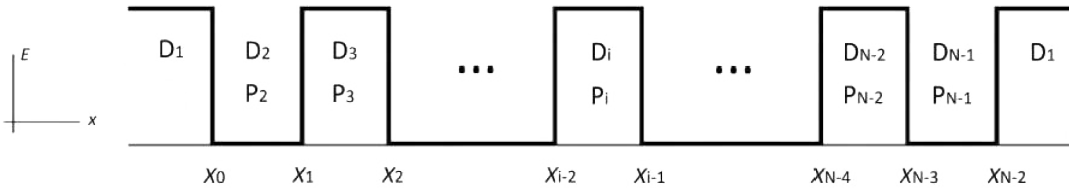


Figura 2.7: Sistema multicapas de grafeno conformado por  $N - 1$  pozos de potencial, aquí se muestran las matrices dinámicas y de propagación correspondientes a las diferentes regiones del sistema.

Un estado acotado describe un sistema en el que una partícula está sujeta a un potencial tal que la partícula tiene una tendencia a permanecer localizada en una o más regiones del espacio. El potencial puede ser ya sea un potencial externo, o puede ser el resultado de la presencia de otra partícula. Con esto en mente, es sencillo calcular el espectro de energía de los estados acotados solamente basta con cambiar de condiciones a la frontera blandas a condiciones a la frontera duras, esto es, que el ancho de la primera y última barrera se extienda hasta el infinito (Fig. 2.7), de modo que se garantice el confinamiento las partículas. El resto del cálculo es muy análogo al caso de la transmitancia mencionado en las secciones previas, para ello hacemos uso del formalismo de la Matriz de Transferencia, por consiguiente, se establece la condición de continuidad en la primer interfaz de nuestro sistema ubicada en  $x = x_0 = 0$ ,

$$\psi_q^\pm(0) = \psi_k^\pm(0), \quad (2.84)$$



donde la ecuación de continuidad toma la forma,

$$A_1 \psi_q^+ + B_1 \psi_q^- = A_2 \psi_k^+ + B_2 \psi_k^- . \quad (2.85)$$

Para la segunda interfaz ubicada en  $x = x_1$ , la condición de continuidad es,

$$\psi_k^\pm(x_1) = \psi_q^\pm(x_1), \quad (2.86)$$

por lo que la ecuación de continuidad resulta,

$$A_2 \psi_k^+ + B_2 \psi_k^- = A_3 \psi_q^+ + B_3 \psi_q^- . \quad (2.87)$$

Sustituyendo las funciones de onda correspondientes definidas por la ec. (2.2) y la ec. (2.6) con sus respectivas particularidades (sustratos o electrostático), es posible establecer una conexión entre las amplitudes  $A_1, B_1$  en términos de las amplitudes  $A_3, B_3$  (caso de un solo pozo) tal que,

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = M^{BS} \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix}, \quad (2.88)$$

con  $M^{BS}$  la Matriz de Transferencia de los estados acotados para un pozo dada por,

$$M^{BS} = D_1^{-1} D_2 P_2 D_2^{-1} D_1, \quad (2.89)$$

asimismo, se puede expresar la forma matricial en un sistema de ecuaciones como,

$$A_1 = M_{11}^{BS} A_3 + M_{12}^{BS} B_3, \quad (2.90)$$

$$B_1 = M_{21}^{BS} A_3 + M_{22}^{BS} B_3, \quad (2.91)$$

donde el uso del superíndice “BS” indica que los elementos matriciales  $M_{ij}$  pertenecen al caso de estados acotados y no al cálculo de la transmitancia. La condición necesaria que garantiza la presencia de estados acotados es que el vector de onda fuera del pozo de potencial sea imaginario puro,

$$q_x \longrightarrow i\alpha_x, \quad \text{con } \alpha_x \in R, \quad (2.92)$$

en este sentido, un estado acotado se caracteriza por una función de onda que decae exponencialmente en ambos lados del pozo de potencial, razón por la cual los coeficientes  $A_1$  y  $B_3$  son exigidos a ser iguales a cero, debido a que sus respectivas funciones de onda dejan de ser propagantes para ser ondas divergentes, por tanto, para la existencia de estados acotados se tiene que satisfacer la siguiente ecuación:

$$M_{11}^{BS}(q_x \longrightarrow i\alpha_x) = 0. \quad (2.93)$$

Generalizando el procedimiento anterior para el caso de  $N - 1$  pozos de potencial (Fig. 2.7), resulta una ecuación trascendente entre la energía y el vector de onda transversal que tiene la misma forma que el caso del pozo ec. (2.93) solamente que ahora el elemento matricial  $M_{11}^{BS}$  pertenece a,

$$M_{11}^{BS} = D_1^{-1} \left[ \prod_{l=2}^{N-2} D_l P_l D_l^{-1} \right] D_1. \quad (2.94)$$

Por tanto, podemos utilizar el método de la Matriz de Transferencia para estimar la energía de los estados acotados, cuyas soluciones vienen dadas a través de la ecuación trascendente las cuales definen sus energías  $E = E_n(k_y)$  dentro de nuestro sistema de interés (sustrato o electrostático).



### 3. Resultados y Discusión

En este capítulo se presentan en concreto el trabajo realizado y sus resultados, así como una discusión de estos. Para comenzar, nuestro objeto de estudio fue una estructura con orden aperiódico siguiendo la secuencia de Thue-Morse en grafeno. Éstas las conseguimos de dos formas:

- Por medio de un potencial electrostático.  
Es bien sabido que en dispositivos basados en semiconductores el efecto del campo eléctrico tiene un rol fundamental debido a su habilidad para modular las propiedades de transporte y optoelectrónicas de una manera muy fácil. Esto es posible gracias al avance y a la sofisticación en las técnicas de crecimiento y deposición, específicamente a la deposición de contactos metálicos en estructuras semiconductoras. A pesar de que el grafeno es una estructura bidimensional, es posible hacer este tipo de dispositivos, los cuales consisten en una hoja de grafeno situada sobre un sustrato como el  $SiO_2$  el cual no rompe la simetría. Teóricamente, se toma en cuenta directamente un campo electrostático perpendicular ya que el efecto principal de éste es un corrimiento de los conos de Dirac proporcional a la intensidad del campo.
- Por medio de un sustrato.  
Al igual que el efecto del campo eléctrico, los sustratos han resultado ser la piedra fundamental en la era de la microelectrónica y la nanoelectrónica. Con respecto al grafeno, los sustratos pueden abrir un gap de energía, también como cambiar la forma de la relación de dispersión. Se ha reportado experimentalmente que el grafeno crecido en  $SiC$  interactúa con el grafeno creando un gap, lo cual da origen a una ruptura en la simetría de la red hexagonal del grafeno. Adicionalmente, es importante mencionar que debido a éste gap inducido por el sustrato, cantidades como el pseudo espín no se conservan y consecuentemente se descarta el tunelamiento Klein.

### 3.1 Sistema electrostático

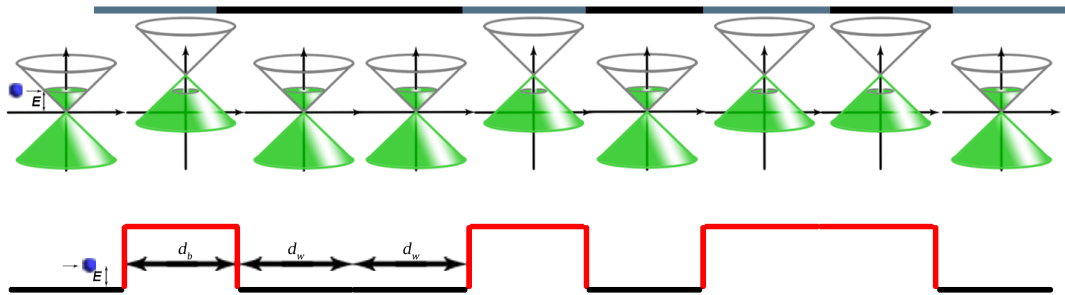


Figura 3.1: Caso electrostático: Representación de los potenciales para la estructura de grafeno con una sucesión aperiódica Thue-Morse.

En la Fig. 3.1, se esquematiza los potenciales para una estructura cuasiperiódica Thue-Morse donde se formaron las barreras con un campo electrostático. Se ve como los conos de Dirac se corren de manera proporcional al campo electrostático, el cual para este trabajo es  $V_0 = 0.13$  eV, esto para poder hacer una comparación con el sistema de sustrato, ya que el bandgap generado por un sustrato tal como *SiC* en una monocapa de grafeno es del orden de 0.26 eV [51]. Otro parámetro importante en el sistema es la anchura de las barreras y los pozos la cual la fijamos a  $d_b = d_w = 50a$ , donde  $a$  es la distancia carbón-carbón en el grafeno.

#### 3.1.1 Probabilidad de Transmisión

##### Probabilidad de Transmisión como función de la energía

Primero mostraremos la transmitancia en función de la energía. Usamos dos ángulos  $30^\circ$  (Fig. 3.2) y  $45^\circ$  (Fig. 3.4).  $N$  representa el número de generación. Para la secuencia usada en este trabajo el número de barreras es igual a  $2^{N-1}$ . Hemos hecho una comparación gráfica con un sistema regular con el mismo número de barreras. En la Fig. 3.2 se toma un ángulo fijo en  $30^\circ$ , la primera columna se muestra el sistema Thue-Morse, en la segunda el sistema periódico y en la tercera una superposición de los dos sistemas, para cada fila se muestran las generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$ , respectivamente.

La primera gráfica de la Fig. 3.2 para el caso de la secuencia Thue-Morse, corresponde a la generación  $N = 3$ , lo que es igual a 4 barreras. Se observa como la dependencia de la Energía para la Transmitancia es abrupta, teniendo regiones en las cuales algunas energías tienen transmisión 1 y otras donde la transmisión es menor. También se destacan dos regiones donde la transmisión es nula. Para el caso periódico también se forman regiones con picos de transmisión solo que esta es una curva suave con máximos en 1. Asimismo encontramos en la parte central dos regiones con transmisión cero.

Refiriéndonos ahora a la tercer gráfica de la primera fila, podemos ver que las regiones de transmisión (bandas) son prácticamente, iguales la diferencia importante la encontramos en las regiones donde no hay transmisión (gaps), ya que para el caso Thue-Morse

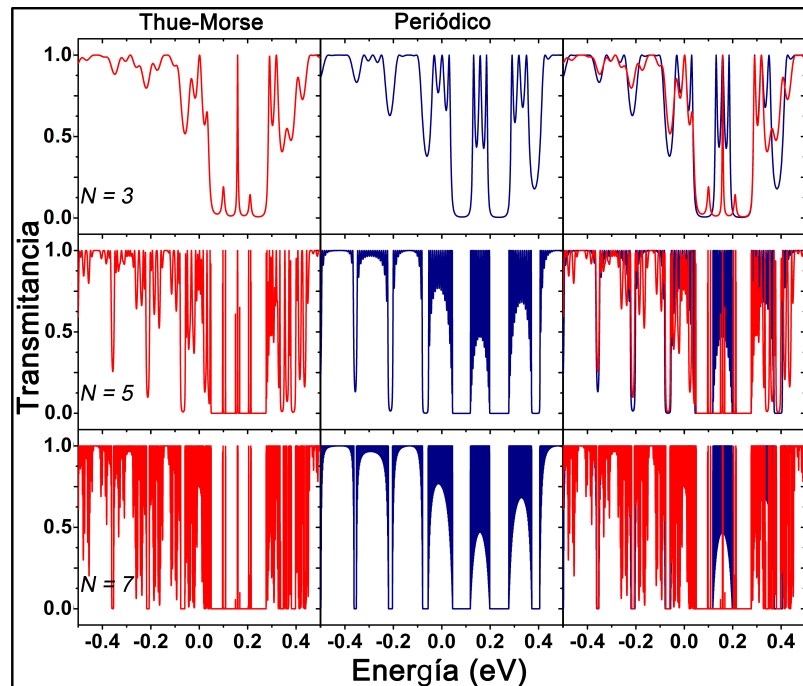


Figura 3.2: Transmitancia vs Energía, ángulo fijo  $30^\circ$ , generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$  (de arriba hacia abajo) para un sistema aperiódico Thue-Morse (primer columna), sistema periódico (segunda columna) y una comparación entre los dos sistemas (tercer columna).

aparecen picos de transmisión en la región donde aparecen gaps para el caso periódico. Avanzando a la segunda fila de la Fig. 3.2, la generación es  $N = 5$  lo que equivale a 16 barreras. Para el caso Thue-Morse vemos que se aumentó el número de picos de transmisión, además los máximos ahora son en transmisión 1 y los mínimos ahora son en transmisión más baja que en el caso anterior. Para el caso periódico también se aumentó el número de picos de transmisión y los mínimos también son menores, las bandas de transmisión están muy bien definidas. Al observar la comparación de los dos sistemas, en la tercera columna vemos que las bandas se mantienen también para el caso Thue-Morse y además aparecen más picos de transmisión en la región de los gaps del caso periódico. Por lo que se refiere a la tercer fila, la generación es  $N = 7$  corresponde a 64 barreras. En el caso Thue-Morse vemos que la tendencia es aumentar el número de picos de transmisión así como a decrecer los mínimos a cero a medida que se aumenta el número de generación. Además las bandas solo son evidentes al observar la comparación de los dos sistemas, en la tercera columna. Para el caso periódico el aumentó en el número de picos de transmisión es mayor y los bordes de las bandas de transmisión decrecen a cero a medida que aumenta el número de generación. En esta generación sigue siendo clara la formación de picos de transmisión para el caso Thue-Morse en las regiones donde se encuentran los gaps para el caso periódico.

Ahora bien, para tener un panorama más amplio sobre lo que sucede en las bandas y los gaps, analicemos la Fig. 3.3, donde se muestra a detalle la transmitancia como función de

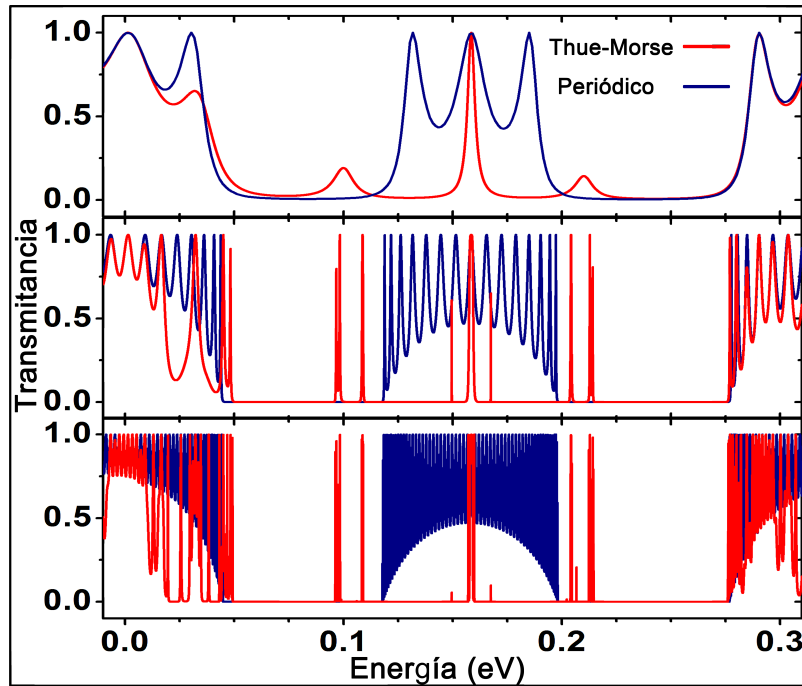


Figura 3.3: Gráfica detallada de la Transmitancia como función de la Energía, ángulo fijo  $30^\circ$ , generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$  (de arriba hacia abajo).

la energía, con ángulo fijo igual a  $30^\circ$ , solo en la región de 0 a 0.3 eV. Sabemos que para un sistema periódico de barreras, aparecen bandas de transmisión donde hay exactamente  $N_B - 1$  valores de energía para los cuales la transmitancia es 1,  $N_B$  son el número de barreras. Además sabemos que a medida que el número de barreras aumenta, las bandas aparecen en los mismos intervalos de energía y la transmisión decrece para los valores mínimos.

Se puede ver de la gráfica que el sistema de barreras con orden Thue-Morse, se comporta en forma parecida al sistema periódico ya que las bandas también aparecen en los mismos intervalos de energía y la transmisión decrece a medida que aumenta el número de barreras. Ahora, las diferencias entre sistemas son más evidentes en estas gráficas, se ve que los picos de transmisión no son todos igual a 1. Y la fragmentación, que es el crecimiento de energías con transmisión diferente de cero, ocurre en los mismos intervalos excepto en los gaps. En éste caso también hay fragmentación en la región de gap del sistema periódico.

En relación con la variación del ángulo, en la siguiente Fig. 3.4 se toma un ángulo fijo de  $45^\circ$ , mostramos en la primer columna el sistema Thue-Morse, en la segunda el sistema periódico y en la tercera una superposición de los dos sistemas, para cada fila se muestran las generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$ , respectivamente. La primer gráfica de la Fig. 3.4 para el caso de la secuencia Thue-Morse, corresponde a la generación  $N = 3$ , lo que es igual a 4 barreras. Podemos ver que el comportamiento es similar al del ángulo  $30^\circ$  ya que la dependencia de la Energía para la Transmitancia sigue siendo abrupta, teniendo regiones

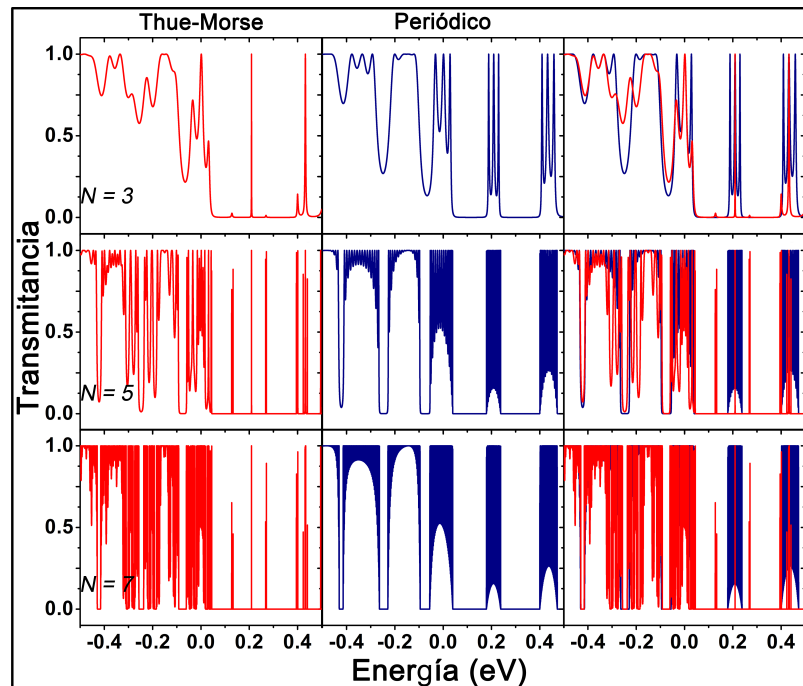


Figura 3.4: Transmitancia vs Energía, ángulo fijo  $45^\circ$ , generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$  (de arriba hacia abajo) para un sistema aperiódico Thue-Morse (primer columna), sistema periódico (segunda columna) y una comparación entre los dos sistemas (tercer columna).

en las cuales algunas energías tienen transmisión 1 y otras donde la transmisión es menor. La diferencia es que en los bordes de las bandas la transmitancia tiende a bajar a cero. También las dos regiones de los gaps son ahora más anchas. Para el caso periódico también los bordes de las bandas de transmisión tienden a bajar a cero y los gaps son más anchos. De la comparación de los dos sistemas en la tercera gráfica de la primera fila, podemos ver que las bandas de transmisión son prácticamente iguales, y volvemos a encontrar fragmentación para el caso Thue-Morse en la región de los gaps del caso periódico.

Siguiendo con la segunda fila de la Fig. 3.4, la generación es  $N = 5$  lo que equivale a 16 barreras. Para el caso Thue-Morse vemos que se aumentó el número de picos de transmisión, además los máximos ahora son en transmisión 1 y los mínimos ahora son en transmisión más baja que en la generación anterior. Para el caso periódico también se aumentó el número de picos de transmisión y los mínimos también son menores, las bandas de transmisión están muy bien definidas. Al observar la comparación de los dos sistemas, en la tercera columna vemos que las bandas se mantienen también para el caso Thue-Morse y además aparecen más picos de transmisión en la región de los gaps del caso periódico. Y para la tercer fila donde la generación es  $N = 7$  lo que corresponde a 64 barreras. En el caso Thue-Morse vemos que la tendencia es aumentar el número de picos de transmisión así como a decrecer los mínimos a cero a medida que se aumenta el número de generación. Además las bandas solo son evidentes al observar la comparación de los dos

sistemas, en la tercera columna. Para el caso periódico el aumentó en el número de picos de transmisión es mayor y los bordes de las bandas de transmisión decrecen a cero a medida que aumenta el número de generación. En esta generación sigue siendo clara la formación de picos de transmisión para el caso Thue-Morse en las regiones donde se encuentran los gaps para el caso periódico.

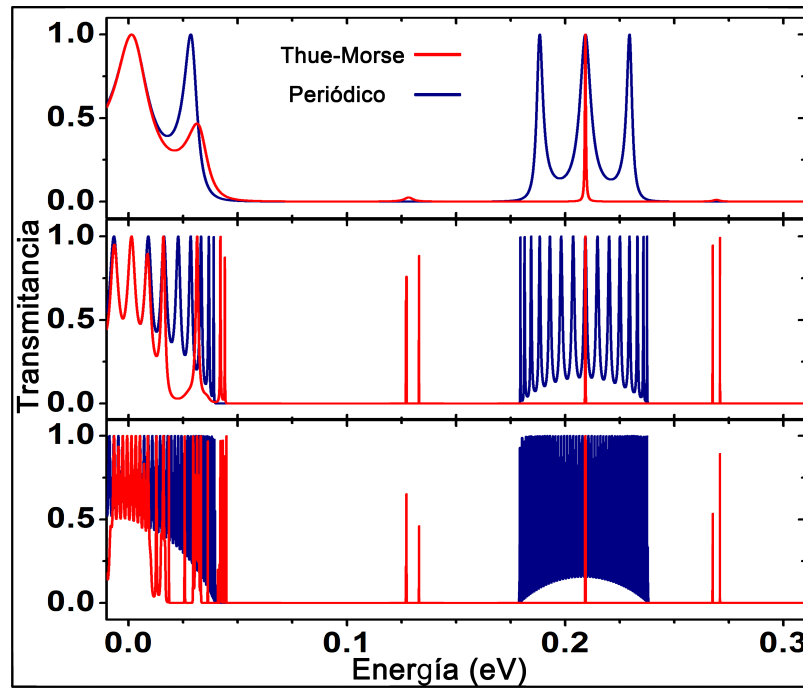


Figura 3.5: Gráfica detallada de la Transmitancia en función de la Energía, ángulo fijo  $45^\circ$ , generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$  (de arriba hacia abajo).

La Fig. 3.5 muestra a detalle la transmitancia en función de la energía, con ángulo fijo igual a  $45^\circ$  solo en la región de 0 a 0.3 eV. Vemos que para el sistema periódico de barreras, se cumple que en las bandas de transmisión hay exactamente  $N_B - 1$  valores de energía para los cuales la transmitancia es 1,  $N_B$  son el número de barreras. Además sabemos que a medida que el número de barreras aumenta las bandas aparecen en los mismos intervalos de energía y la transmisión decrece.

Se puede ver de la gráfica que el sistema de barreras con orden Thue-Morse, se comporta en forma parecida al sistema periódico ya que las bandas también aparecen en los mismos intervalos de energía y la transmisión decrece a medida que aumenta el número de barreras. Las diferencias entre sistemas son más evidentes en estas gráficas, se ve que los picos de transmisión no son todos igual a 1. Y la fragmentación ocurre en los mismos intervalos excepto en los gaps. En éste caso también hay fragmentación en la región de gap del sistema periódico. Al variar el ángulo de incidencia solo podemos encontrar que los gaps son más amplios y que la transmisión tiende a descender a cero a medida que aumentamos el ángulo. El comportamiento general no depende de la variación del ángulo.



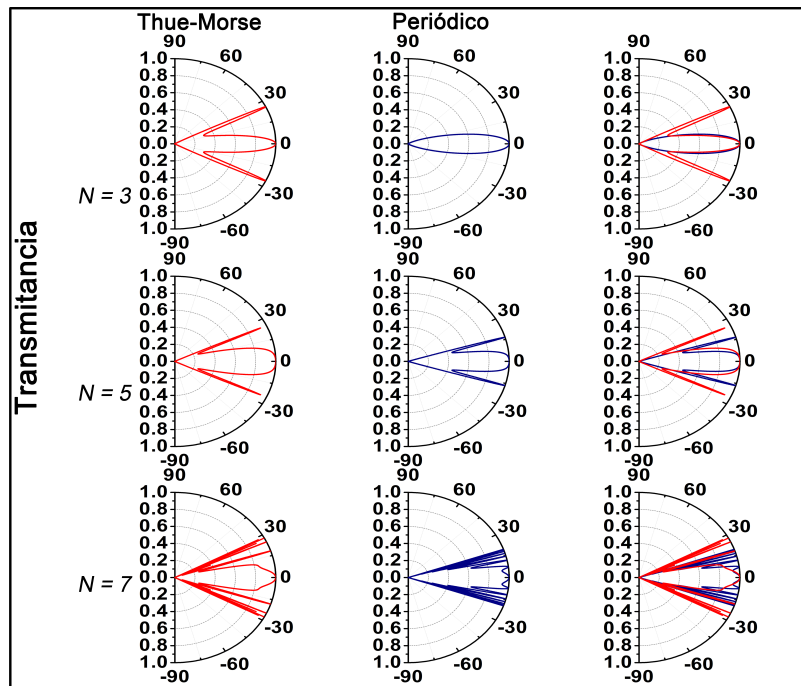


Figura 3.6: Transmitancia vs Ángulo, energía fija  $E = 0.05$  eV, generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$  (de arriba hacia abajo) para un sistema aperiódico Thue-Morse (primer columna), sistema periódico (segunda columna) y una comparación entre los dos sistemas (tercer columna).

### Probabilidad de Transmisión como función del ángulo

Ahora presentamos la probabilidad de transmisión como función del ángulo, fijamos la energía en los valores  $0.05$  eV y  $0.10$  eV, Fig. 3.6 y Fig. 3.7 respectivamente. Se muestran los casos respectivos a las generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$  y al igual que en el caso para ángulo fijo, se hace la comparación con el sistema periódico. Recordemos que la altura de las barreras es  $V_0 = 0.13$  eV y la anchura de las barreras y los pozos las fijamos en  $d_b = d_w = 50a$ .

Para empezar, en la Fig. 3.6 tenemos en la primer columna el caso de barreras con ordenamiento Thue-Morse, en la segunda columna el caso de barreras con ordenamiento periódico y en la tercer columna la comparación de los dos casos. Así, podemos ver que para los dos casos aparecen regiones donde la transmisión es perfecta y a medida que la generación aumenta estas regiones se fragmentan, encontrando resonancias solo en la región de  $-30^\circ$  a  $30^\circ$ . Además, podemos ver el efecto Klein donde para el ángulo  $0^\circ$  la probabilidad de transmisión siempre es perfecta. La diferencia entre los dos sistemas, que se observa en la tercera columna, es la ya mencionada anteriormente fragmentación tanto en la región de transmisión como en las regiones donde no hay transmisión.

Y para la energía fija  $E = 0.10$  eV Fig. 3.7, ésta está muy cercana al borde de la barrera. El comportamiento es parecido a la de la energía  $E = 0.05$  eV ya que la fragmentación la encontramos en la región de  $-30^\circ$  a  $30^\circ$ , solo que ahora encontramos mayor fragmentación a medida que se aumenta la generación.

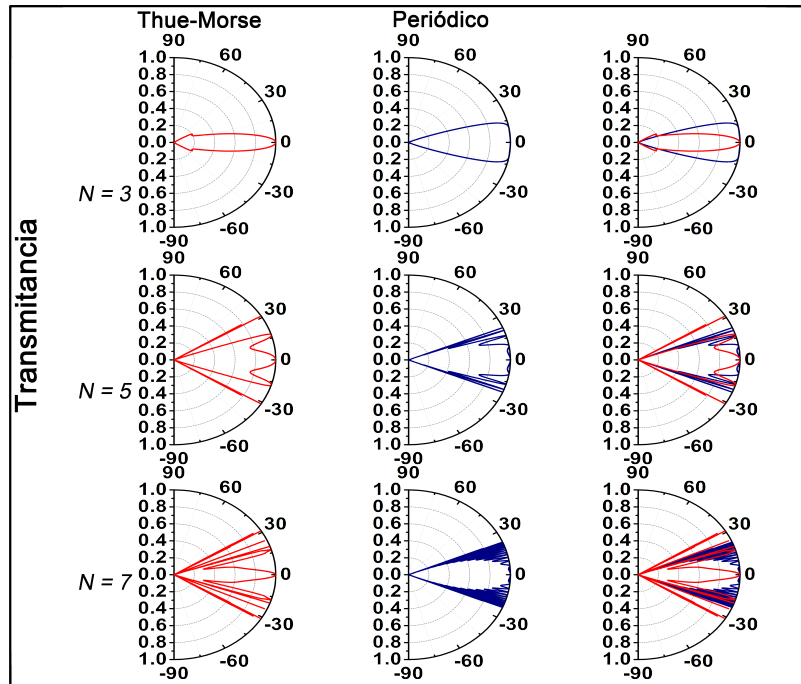


Figura 3.7: Transmitancia vs Ángulo, energía fija  $E = 0.1$  eV , generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$  (de arriba hacia abajo) para un sistema aperiódico Thue-Morse (primer columna), sistema periódico (segunda columna) y una comparación entre los dos sistemas (tercer columna).

### 3.1.2 Transporte electrónico

El siguiente caso a analizar es el de las curvas de conducción en función de la energía de Fermi  $E_F$ , los parámetros usados son los mismos de las gráficas anteriores. De la Fig. 3.8, la primer columna se muestra el sistema Thue-Morse, en la segunda el sistema periódico y en la tercera una superposición de los dos sistemas, para cada fila se muestran las generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$ , respectivamente. Las curvas están normalizadas a el factor de conductancia fundamental  $G_0$  y a la energía  $E_0 (= V_0 = t')$ .

Así pues, en la primer fila tenemos la generación  $N = 3$ , sabemos que la periodicidad nos traerá bandas de conducción, lo que se refleja en la formación de picos en la conductancia, sobresale la formación de picos en la parte negativa que corresponde a los huecos, donde no se alzan barreras en este caso, aclarando que no existe simetría. Sólo un pico en la parte correspondiente a los electrones resalta por su amplitud y por estar en el rango de energía para ser considerado como estado acotado. Se puede ver que la conductancia efectiva  $G$  desaparece en la energía de Fermi  $E_F = 0$  en los dos sistemas, periódicos y cuasiperiódicos. Para el caso cuasiperiódico encontramos más picos en la parte positiva a comparación del caso periódico, cada una de estas oscilaciones corresponde a una banda conducción (ver sección de estados acotados para más detalles).

En la fila 2, la generación es  $N = 5$ , vemos que han aparecido resonancias con muy poca amplitud dentro de las bandas de transmisión, para ambos casos aunque en el caso aperiódico hay más de estas resonancias que en el periódico. También, las resonancias aparecen

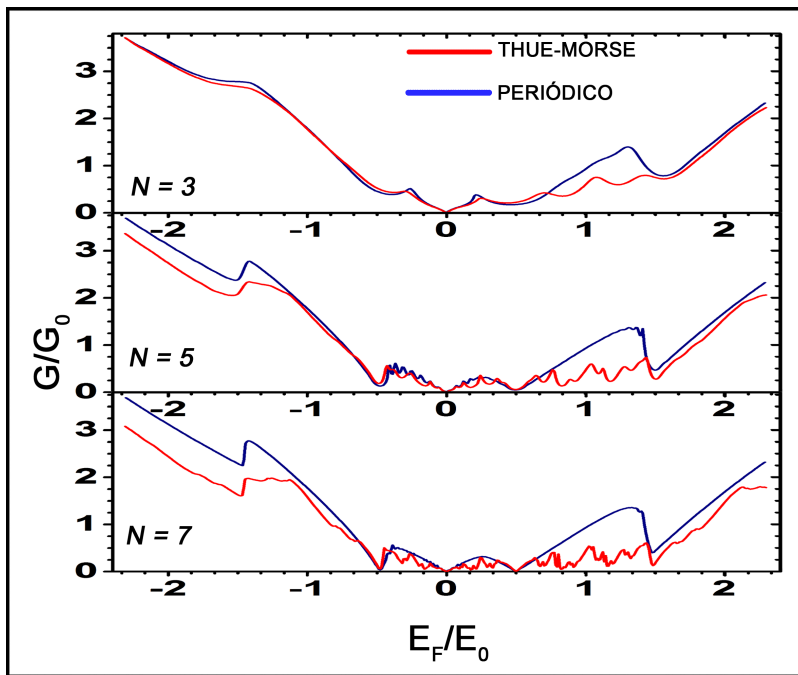


Figura 3.8: Conductancia vs Energía de Fermi, generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$  para un sistema periódico (línea azul) y sistema aperiódico Thue-Morse (línea roja).

en la parte correspondiente a los huecos, pero sin llegar a mostrar alguna simetría. Y asimismo en la tercer fila, donde la generación es  $N = 7$ , el comportamiento se mantiene. Por lo que se puede concluir que a medida que aumenta la generación el sistema muestra más resonancias.

En el trabajo de Xu y colaboradores [41], se expone el caso periódico, mostrando que al variar el ancho de los pozos se modifican la localización y el ancho de las bandas de conducción y que el variar el número de generación solo afecta en el número de picos resonantes dentro de las bandas. Por lo tanto, si dirigimos esta conclusión a el caso aperiódico Thue-Morse vemos, que a medida que se aumenta el número de generación aumentan las resonancias dentro de las bandas, pero a comparación del sistema periódico hay más bandas de conducción lo que se podría ver como un aumento en el ancho de los pozos. Esto tiene mucha coherencia si recordamos que la secuencia Thue-Morse admite regiones donde se repiten tanto los pozos como las barreras.

Cabe, mencionar que el comportamiento descrito para el sistema Thue-Morse, no es general para todos los sistemas cuasiperiódicos. Esto es, para una estructura formada con la regla de Cantor [52], al ir aumentando el número de barreras, la curva de conductancia se suaviza y los picos que se forman a bajas generaciones van desvaneciendo, esto debido a que para esta secuencia se usa un ancho de partida fijo y a medida que se forman las barreras el margen para la conducción es mayor.

También usando la secuencia de Fibonacci [53] los resultado varían, como ya se había visto, esta secuencia solo admitía regiones de doble barrera, entonces se esperaría que al

variar el número de generación se encontrara con un número de picos resonantes dentro de las bandas parecido al encontrado en el caso periódico y también esperaríamos que la conductancia sería menor debido a que habría regiones donde las barreras tendrían el doble de ancho, y efectivamente esto ocurre y puede ser corroborado en [53].

Ahora, aunque las curvas de transmisión muestran el comportamiento de la transmitancia en función de la energía y el ángulo de incidencia, éstas nos servirán para tener una mejor claridad de los resultados encontrados en la conductancia. Por tal, refiriéndonos a la Fig. 3.9, las gráficas de arriba muestran los contornos para la estructura Thue-Morse, mientras que las de abajo son las respectivas para la estructura periódica. El color gris corresponde a transmitancia cero y el rojo a transmitancia uno.

A primera vista los dos sistemas muestran un comportamiento similar, en los dos se cumple que para incidencia normal y ángulos pequeños la transmitancia es perfecta en todo el rango de energía, aunque el sistema cuasirregular se ve con más desorden ya que las curvas que se forman presentan más ruido, es decir no se ven tan definidas como para el caso periódico.

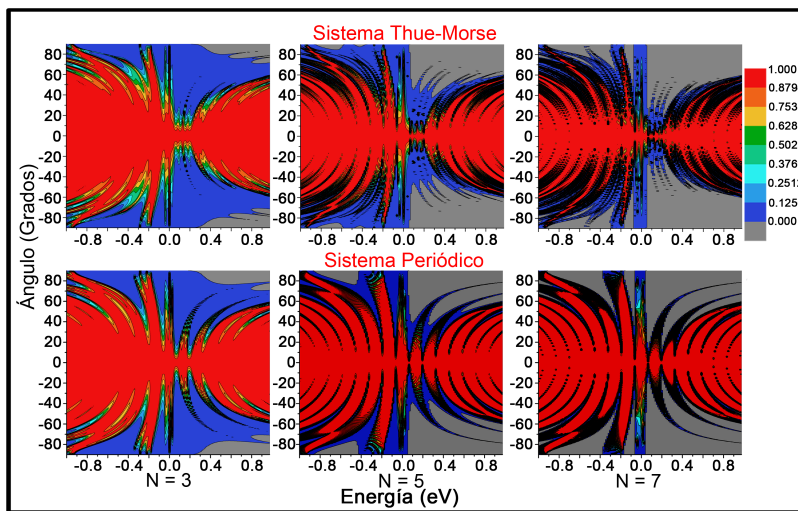


Figura 3.9: Contornos de Transmisión, generaciones  $N = 3, 5, 7$  para el sistema aperiódico Thue-Morse (Arriba) y para un sistema periódico (Abajo).

### 3.1.3 Ingeniería de Band Gap

Con el fin de develar las diferencias fundamentales entre la ingeniería de band-gap dependiente del ángulo de las superredes de grafeno aperiódico y periódico, calculamos las propiedades de transmisión de TM-GSLs para generaciones específicas y las correspondientes para Periódica-GSLs, cuidamos que el número de barreras en ambos sistemas sean los mismos. En la Fig. 3.10 presentamos la transmisión para la quinta ( $N = 5$ ) y la séptima ( $N = 7$ ) generación de TM-GSL. A medida que la cantidad de barreras  $N_B$  se escala en  $2^{N-1}$ , las generaciones mencionadas tienen 16 y 64 barreras. Las GSL periódicas se han elegido de modo que los períodos (barreras) se correspondan precisamente con estos

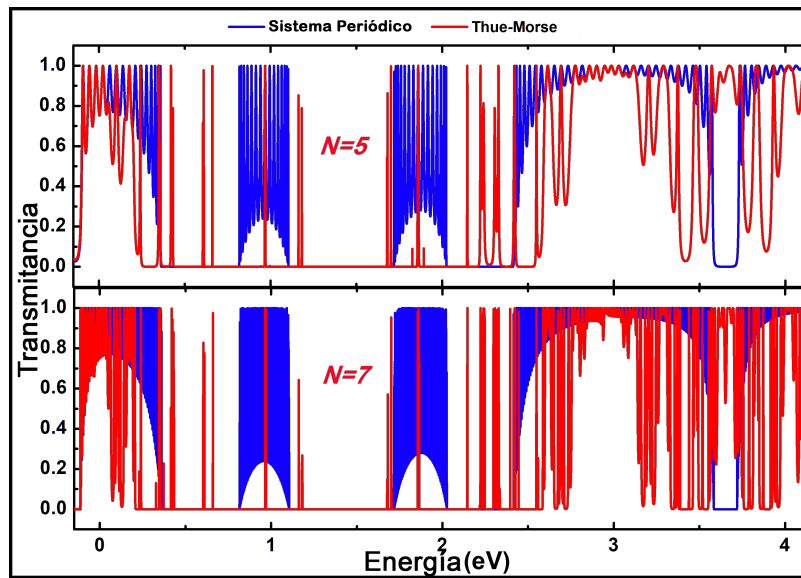


Figura 3.10: Transmitancia vs Energía para TM-GSLs con (a)  $N = 5$  y (b)  $N = 7$ . Como referencia, se ha incluido la transmitancia de las periódicas-GSLs, curvas azules. El ángulo de incidencia considerado es  $\theta = 30^\circ$ . Los parámetros de superposición son:  $V_0 = 1.0$  eV y  $d_B = d_W = 10$ . Con la distancia carbono-carbono en el grafeno,  $0.142\text{nm}$ . El número de barreras en las superred periódica y la aperiódica es el mismo.

números. Del mismo modo, los parámetros de superlattice, para todos los casos en la Fig. 3.10, son los mismos:  $V_0 = 1.0$  eV,  $d_B = d_W = 10a$ , y  $\theta = 30^\circ$ .

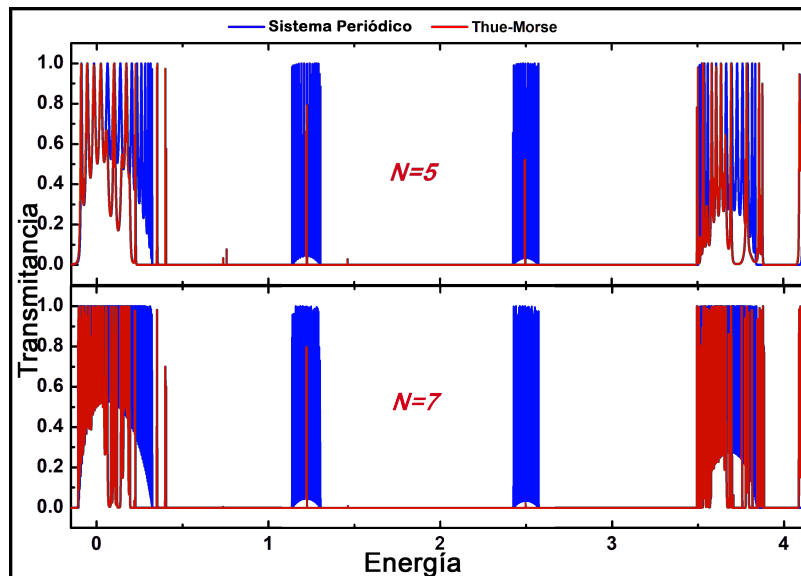


Figura 3.11: Lo mismo que en la Fig. 3.10, pero aquí el ángulo de incidencia es  $45^\circ$

Se introducen dos modificaciones principales con la aperiodicidad de Thue-Morse. Prime-

ro, el ancho y el número de resonancias en las minibandas se reducen considerablemente. Por ejemplo, las minibandas bien definidas de las GSL periódicas a aproximadamente 1 y 2 eV se colapsan en un montón de resonancias cuando se incorpora la aperiodicidad, compare las curvas roja y azul en la Fig. 3.11. Al aumentar la generación de TM-GSL, el grupo mencionado se convierte en una resonancia aguda en el centro de las minibandas, ver Fig. 3.10 b. En segundo lugar, se inducen varias resonancias en las gap de transmisión de las GSL periódicas. Esta característica está asociada al carácter aleatorio predominante de las superredes Thue-Morse. Con el número de generación,  $N$ , estas brechas se agrupan en minibandas estrechas que modifican totalmente el panorama de transmisión. Estas resonancias también impiden que podamos definir fácilmente los band-gaps de transmisión principales como en el caso de las GSL periódicas [42]. Sin embargo, al aumentar el ángulo de incidencia podemos barrer (eliminar) la mayoría de las resonancias que dan lugar a a un enorme ancho de banda de transmisión. En particular, con un aumento moderado de  $15^\circ$ , obtenemos un intervalo de banda de transmisión cuatro veces mayor que el correspondiente para las GSL periódicas, ver Fig. 3.11.

También podemos notar resonancias que se mantienen en el centro de las minibandas GSL periódicas. Estas resonancias se pueden disminuir y prácticamente eliminar ajustando la generación y el ángulo de incidencia.

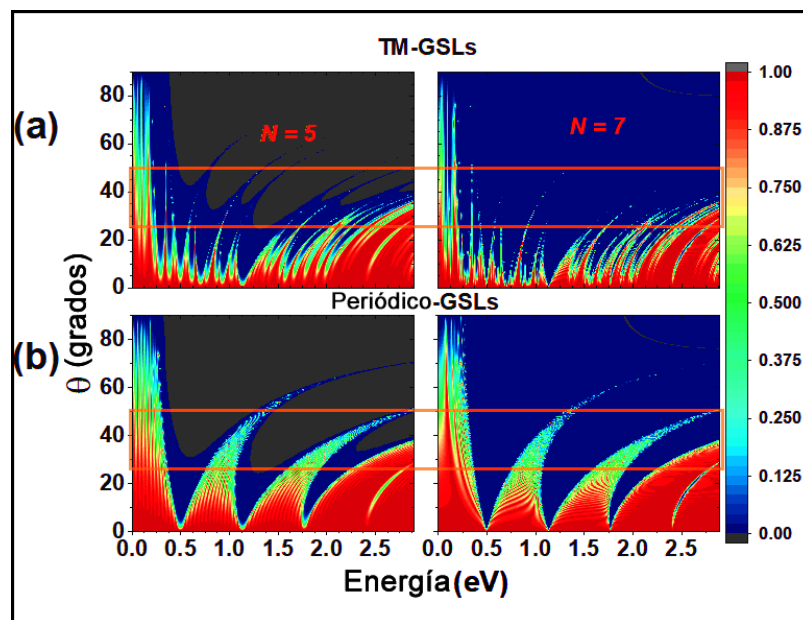


Figura 3.12: Contornos de Transmisión, generaciones  $N = 5, 7$  para el sistema aperiódico Thue-Morse (Arriba) y para un sistema periódico (Abajo).

En la Fig. 3.12 mostramos la transmitancia en función de la energía y el ángulo de incidencia para (a) TM-GSLs y (b) Periódico-GSLs. Esta figura nos permite tener una imagen más amplia de las propiedades de transmisión. A partir de esta figura, queda claro que las minibandas bien definidas para el caso periodico, se ven muy afectadas cuando

se incorpora la aperiodicidad Thue-Morse. De hecho, las minibandas de baja energía se distorsionan y eventualmente se destruyen a medida que aumenta el ángulo de incidencia. Esto da lugar a brechas de transmisión de 1-4 eV en el rango angular de  $15^\circ - 50^\circ$ . Para ángulos mayores de  $50^\circ$  prácticamente no hay diferencia entre las GSL aperiódicas y periódicas. Por lo tanto, el orden aperiódico se puede utilizar como un parámetro adicional para ajustar la ingeniería de intervalo de banda dependiente del ángulo en superlattices de grafeno cerrado. En particular, la aperiodicidad da acceso a gaps de transmisión que no son alcanzables con sistema periódico.

### 3.1.4 Estados Ligados

El espectro de los estados acotados como función del vector  $k_y$  se ilustra en la Fig. 3.13, la anchura de los pozos y las barreras es  $d_b = d_w = 50a$ , se consideraron las generaciones 3, 5 y 7 de la estructura Thue-Morse (primer columna), el sistema periódico (segunda columna) con igual número de barreras y la comparación de los dos casos (tercer columna). Aquí las líneas en color verde delimitan las regiones permitidas para los estados acotados. Hay que destacar que para poder considerar el confinamiento de la partícula, se tienen que usar condiciones duras en la frontera, esto es, las barreras inicial y final tienen un ancho infinito.

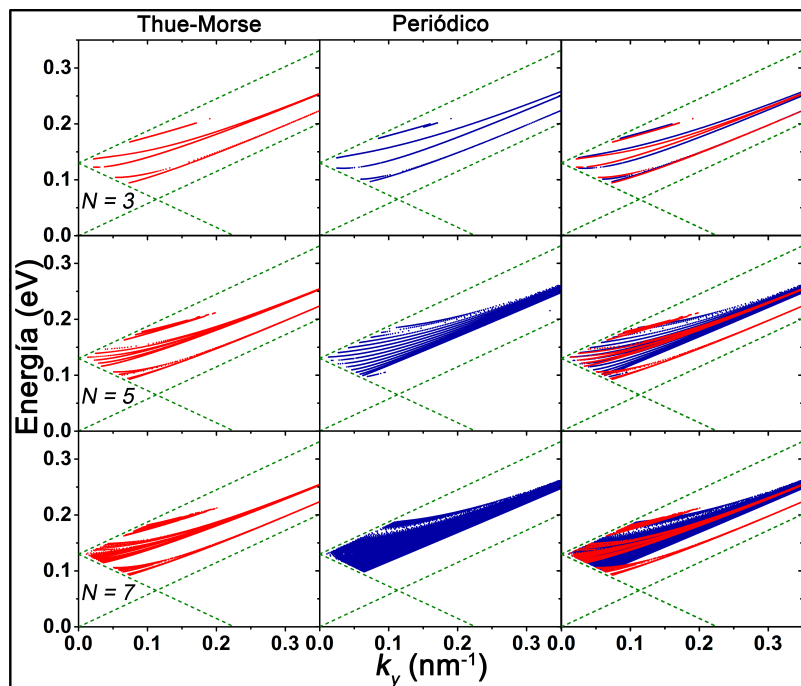


Figura 3.13: Espectro de estados acotados como función de  $k_y$ , generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$  para el sistema aperiódico Thue-Morse (primer columna), un sistema periódico (segunda columna) y la comparación de los dos casos (tercer columna).

Los límites para los estados acotados nos los impone la relación de dispersión, en este caso, lineal. Para la generación  $N = 3$  (primer fila) se ven algunas líneas para los dos casos,

pero no nos muestran mucho el comportamiento de los sistemas. En la comparación se ve un comportamiento parecido. Es en la siguiente fila ( $N = 5$ ) se puede ver que para el caso cuasiperiódico se forman tres regiones dentro de las cuales se han formado subbandas. Y en la tercera fila son más nítidas estas tres bandas que ahora están más llenas, la región está más fragmentada. Para el caso periódico se ve cómo se va fragmentando toda la región permitida conforme se aumenta la generación.

De esta manera, los estados acotados presentados en la Fig. 3.13 corresponden a las curvas de conductancia expuestas en la Fig. 3.8. Se puede observar más claramente la formación de las subbandas y la forma en la que se fragmenta el espectro a medida que se aumenta la generación.

## 3.2 Sistema sustrato

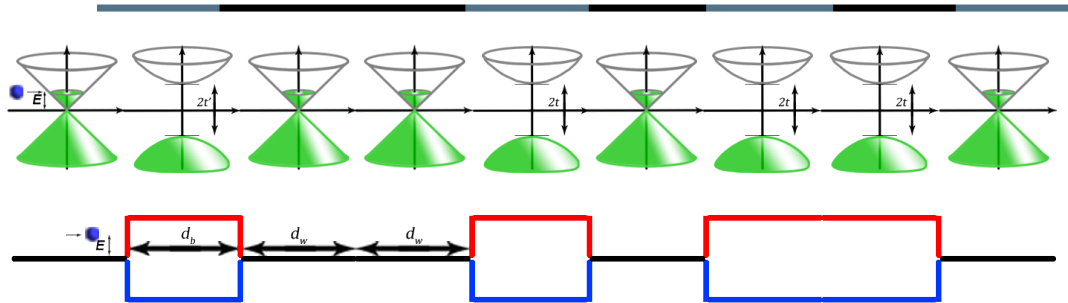


Figura 3.14: Caso sustrato: Representación de los potenciales para la estructura de grafeno con una sucesión aperiódica Thue-Morse.

El siguiente apartado es dedicado a los resultados obtenidos para la estructura formada por un sustrato *SiC*. En la Fig. 3.1, se esquematiza los potenciales para una estructura cuasiperiódica Thue-Morse donde se formaron las barreras por la interacción del sustrato *SiC* con el grafeno. Se ve como se abre un gap con una anchura de  $2t' = 0.26$  eV. Otro parámetro importante en el sistema es la anchura de las barreras y los pozos la cual la fijamos a  $d_b = d_w = 50a$ .

### 3.2.1 Probabilidad de Transmisión

#### Probabilidad de Transmisión como función de la energía

Primero mostraremos la transmitancia como función de la energía. Usamos dos ángulos  $30^\circ$  (Fig. 3.15) y  $45^\circ$  (Fig. 3.17).  $N$  representa el número de generación. En la Fig. 3.15 se toma un ángulo fijo en  $30^\circ$ , la primera columna se muestra el sistema Thue-Morse, en la segunda el sistema periódico y en la tercera una superposición de los dos sistemas, para cada fila se muestran las generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$ , respectivamente. Es importante recordar que, para este sistema, se forman barrera tanto para los electrones como para los huecos. Debido a esto, en nuestra gráfica se aprecia una clara simetría.



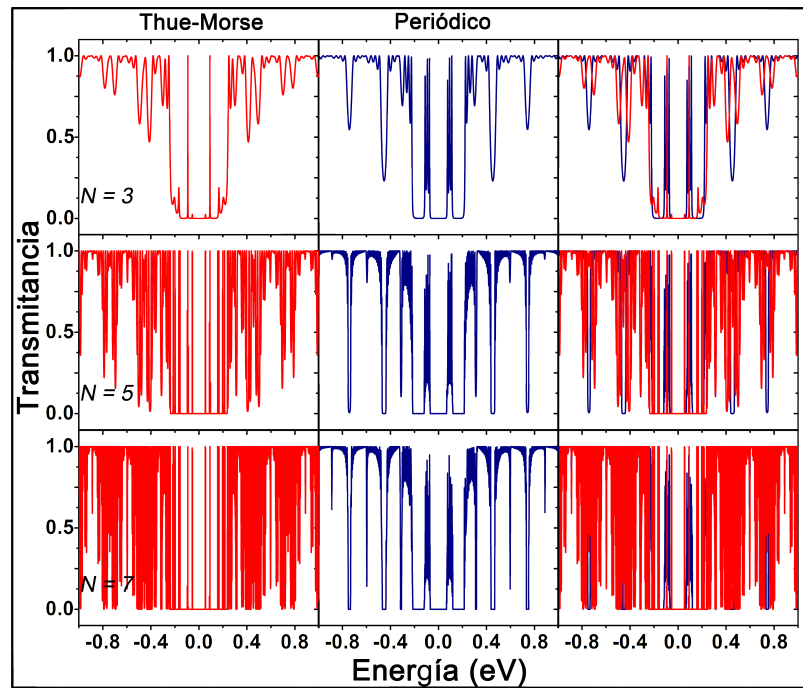


Figura 3.15: Transmitancia vs Energía, ángulo fijo  $30^\circ$ , generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$  (de arriba hacia abajo) para un sistema aperiódico Thue-Morse (primer columna), sistema periódico (segunda columna) y una comparación entre los dos sistemas (tercer columna).

La primer gráfica de la Fig. 3.15 para el caso de la secuencia Thue-Morse, corresponde a la generación  $N = 3$ , lo que es igual a 4 barreras. Se observa como la dependencia de la Energía para la Transmitancia no es tan abrupta en comparación al sistema electrostático, también se tienen regiones en las cuales algunas energías tienen transmisión 1 y otras donde la transmisión es nula. Para el caso periódico también se forman regiones con picos de transmisión con máximos en 1, la curva sigue siendo un poco más suave que para el caso aperiódico Thue-Morse, además los mínimos están más cercanos a una transmisión cero. Refiriéndonos ahora a la tercer gráfica de la primera fila, podemos ver que las regiones de transmisión (bandas) son prácticamente, iguales la diferencia importante la encontramos en las regiones donde no hay transmisión (gaps) ya que para el caso Thue-Morse aparecen picos de transmisión en la región donde aparecen gaps para el caso periódico.

Avanzando a la segunda fila de la Fig. 3.15, la generación es  $N = 5$  equivalente a 16 barreras. Para el caso Thue-Morse vemos que se aumentó el número de picos de transmisión, además los máximos ahora son en transmisión 1 y los mínimos ahora son en transmisión más baja que en el caso anterior. Para el caso periódico también se aumentó el número de picos de transmisión y los mínimos también son menores, las bandas de transmisión están muy bien definidas. Al observar la comparación de los dos sistemas, en la tercera columna vemos que las bandas se mantienen también para el caso Thue-Morse y además aparecen más picos de transmisión en la región de los gaps del caso periódico.

Por lo que se refiere a la tercer fila, la generación es  $N = 7$  corresponde a 64 barreras. En el caso Thue-Morse vemos que la tendencia es aumentar el número de picos de transmisión así como a decrecer los mínimos a cero a medida que se aumenta el número de generación. Además las bandas solo son evidentes al observar la comparación de los dos sistemas, en la tercera columna. Para el caso periódico el aumentó en el número de picos de transmisión es mayor y los bordes de las bandas de transmisión decrecen a cero a medida que aumenta el número de generación. En esta generación sigue siendo clara la formación de picos de transmisión para el caso Thue-Morse en las regiones donde se encuentran los gaps para el caso periódico.

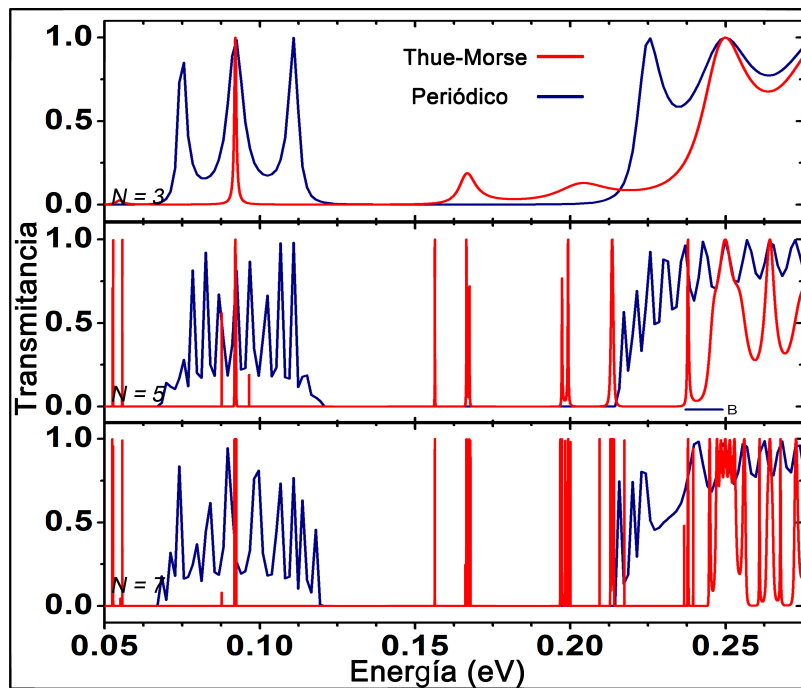


Figura 3.16: Gráfica detallada de la Transmitancia en función de la Energía, ángulo fijo  $30^\circ$ , generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$  (de arriba hacia abajo).

En la siguiente Fig. 3.17 se toma un ángulo fijo de  $45^\circ$ , y se muestra en la primer columna el sistema Thue-Morse, en la segunda el sistema periódico y en la tercera una superposición de los dos sistemas, para cada fila se muestran las generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$ , respectivamente. La primer fila corresponde a la generación  $N = 3$ , lo que es igual a 4 barreras. Podemos ver que el comportamiento es similar que para el ángulo  $30^\circ$  con la diferencia de que en los bordes de las bandas la transmitancia tiende a bajar a cero. También las regiones de los gaps son ahora más anchas. De la comparación de los dos sistemas en la tercera gráfica de la primera fila, podemos ver que las bandas de transmisión son prácticamente iguales, y volvemos a encontrar fragmentación para el caso Thue-Morse en la región de los gaps del caso periódico.

Siguiendo con la segunda fila de la Fig. 3.18, la generación es  $N = 5$  lo que equivale a 16 barreras. Para el caso Thue-Morse vemos que se aumentó el número de picos de

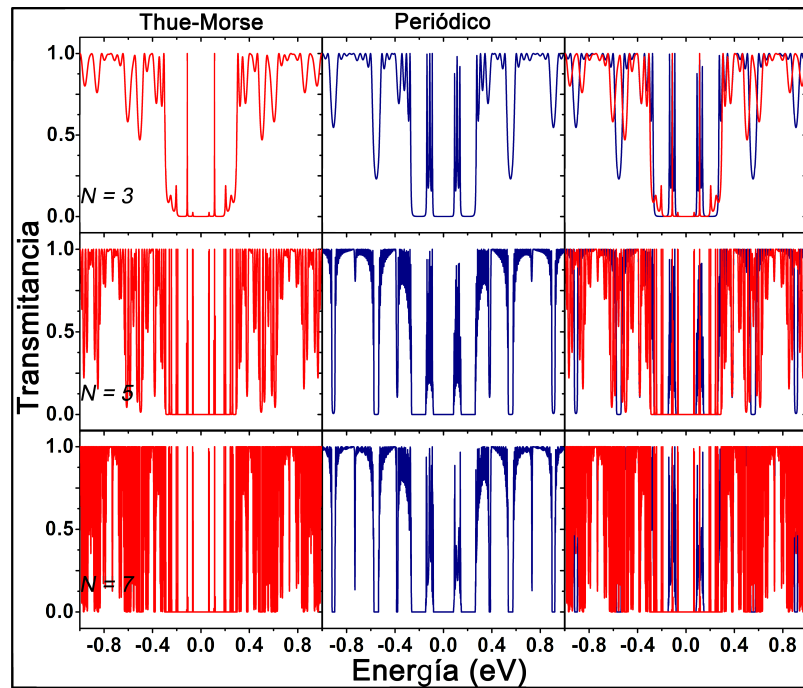


Figura 3.17: Transmitancia vs Energía, ángulo fijo  $45^\circ$ , generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$  (de arriba hacia abajo) para un sistema aperiódico Thue-Morse (primer columna), sistema periódico (segunda columna) y una comparación entre los dos sistemas (tercer columna).

transmisión, además los máximos ahora son en transmisión 1 y los mínimos ahora son en transmisión más baja que en la generación anterior. Para el caso periódico también se aumentó el número de picos de transmisión y los mínimos también son menores, las bandas de transmisión están muy bien definidas. Al observar la comparación de los dos sistemas, en la tercera columna vemos que las bandas se mantienen también para el caso Thue-Morse y además aparecen más picos de transmisión en la región de los gaps del caso periódico.

Y para la tercer fila donde la generación es  $N = 7$  lo que corresponde a 64 barreras. En el caso Thue-Morse vemos que la tendencia es aumentar el número de picos de transmisión así como a decrecer los mínimos a cero a medida que se aumenta el número de generación. Además las bandas solo son evidentes al observar la comparación de los dos sistemas, en la tercera columna. Para el caso periódico el aumentó en el número de picos de transmisión es mayor y los bordes de las bandas de transmisión decrecen a cero a medida que aumenta el número de generación. En esta generación sigue siendo clara la formación de picos de transmisión para el caso Thue-Morse en las regiones donde se encuentran los gaps para el caso periódico.

### Probabilidad de Transmisión como función del ángulo

Ahora variando el ángulo y fijando la energía en  $E = 0.10$  eV y  $E = 0.15$  eV obtenemos las gráficas de la Fig. 3.19 y de la Fig. 3.20. Los demás parámetros se mantienen iguales,

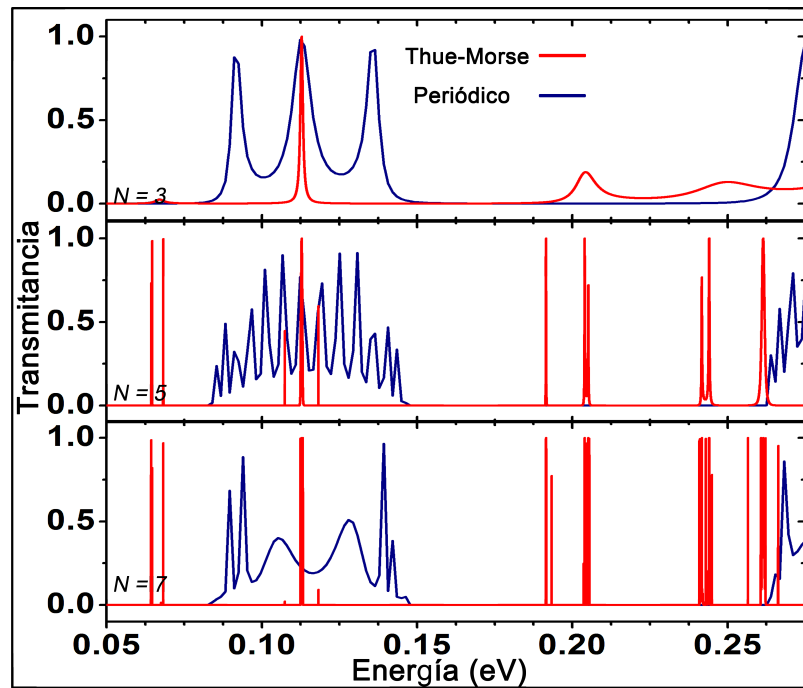


Figura 3.18: Gráfica detallada de la Transmitancia en función de la Energía, ángulo fijo  $45^\circ$ , generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$  (de arriba hacia abajo).

tales como las anchuras de los pozos y de las barreras  $d_w = d_b = 50a$  y la altura de las barreras  $t' = .13$  eV. Para cada energía, mostramos las generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$  para el sistema formado por la secuencia Thue-Morse y el caso periódico además de la comparación de los dos casos. Para empezar, para la Fig. 3.19 tenemos en la primer columna el caso de barreras con ordenamiento Thue-Morse, en la segunda columna el caso de barreras con ordenamiento periódico y en la tercer columna la comparación de los dos casos.

Así, podemos ver que para los dos casos aparecen regiones donde la transmisión es perfecta y a medida que la generación aumenta estas regiones se fragmentan, encontrando resonancias en regiones distintas y mayores a las del sistema electrostático. Además, podemos ver que el efecto Klein no está presente ya que para el ángulo  $0^\circ$  la probabilidad de transmisión siempre es cero. La diferencia entre los dos sistemas, que se observa en la tercera columna, es la ya mencionada anteriormente fragmentación tanto en la región de transmisión como en las regiones donde no hay transmisión.

Y para la energía fija  $E = 0.15$  eV Fig. 3.20, se ve la formación de dos regiones para el caso periódico las cuales se fragmentan al incrementar el número de generación, este comportamiento es diferente al caso Thue-Morse ya que, a medida que se aumenta la generación incrementa el número de regiones y también la fragmentación de dichas regiones.

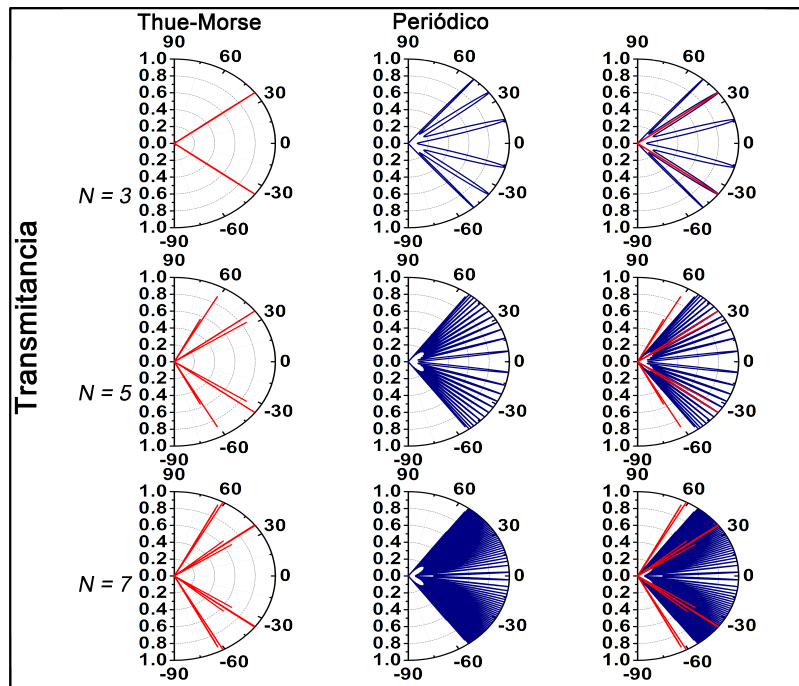


Figura 3.19: Transmitancia vs Ángulo, energía fija  $E = 0.1$  eV, generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$  (de arriba hacia abajo) para un sistema aperiódico Thue-Morse (primer columna), sistema periódico (segunda columna) y una comparación entre los dos sistemas (tercer columna).

### 3.2.2 Transporte electrónico

El siguiente caso a analizar es el de las curvas de conductancia en función de la energía, los parámetros usados son los mismos de las gráficas anteriores. En la Fig. 3.21 las líneas en color azul representan el sistema periódico y en rojo tenemos el sistema aperiódico Thue-Morse.

Así pues, en la primer fila tenemos la generación  $N = 3$ , sabemos que ahora se debe presentar simetría en la dirección de la energía debido a la formación de barreras tanto para electrones como para huecos y que la periodicidad nos traerá la formación de picos en la conductancia. Para el caso periódico estas oscilaciones son obvias alrededor de la energía  $0.7$  donde estaría una banda, en energías más altas también hay oscilaciones pero no se puede distinguir la formación de bandas. Para el caso cuasiperiódico Thue-Morse el comportamiento es muy parecido solo que los valores de la conductancia son menores.

En la fila 2, la generación es  $N = 5$ , vemos que las resonancias han aumentado y las amplitudes de éstas disminuye, para ambos casos aunque en el caso aperiódico no es clara la formación de las bandas como en el periódico, ver Fig. 3.22 donde se muestra una ampliación en el rango de interés. Y asimismo en la tercer fila, donde la generación es  $N = 7$ , el comportamiento se mantiene. Para el sistema electrostático vimos que a medida que aumentaba la generación aparecían más resonancias y el número de bandas se mantenía para el caso periódico y para el cuasiperiódico, solo que en este último había más bandas. Para el sistema sustrato podemos concluir que el comportamiento es el mismo, es decir, el

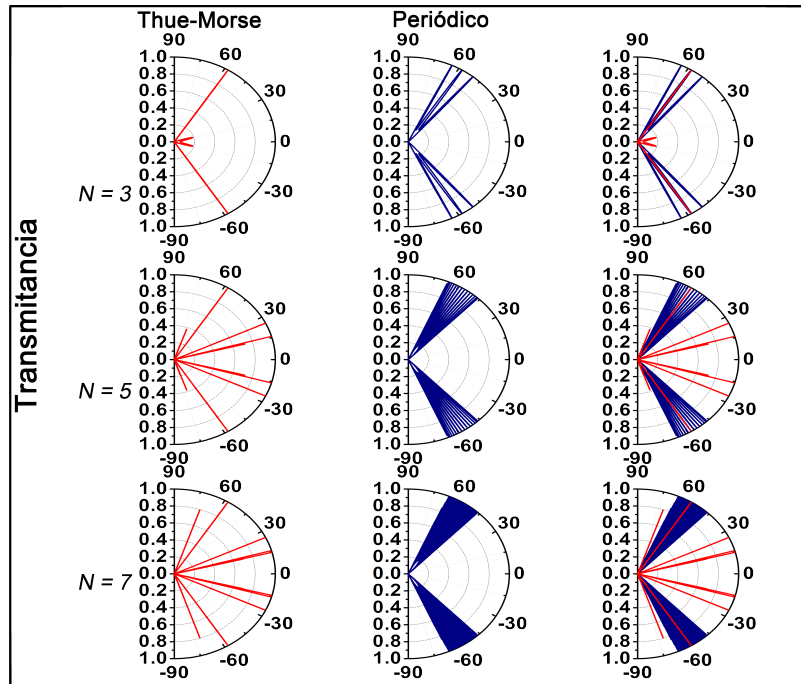


Figura 3.20: Transmitancia vs Ángulo, energía fija  $E = 0.15$  eV , generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$  (de arriba hacia abajo) para un sistema aperiódico Thue-Morse (primer columna), sistema periódico (segunda columna) y una comparación entre los dos sistemas (tercer columna).

numero en la generación solo es responsable de la formación de resonancias dentro de las bandas.

En comparación con otras secuencias aperiódicas, encontramos que para la regla de Cantor [52], al ir aumentando el número de barreras, la curva de conducción se suaviza y los picos que se forman a bajas generaciones van desvaneciendo, esto debido a que para esta secuencia se usa un ancho de partida fijo y a medida que se forman las barreras va quedando más margen para la conducción. Otro característica sobresaliente es la autosimilaridad manifestada entre las curvas de las generaciones 4, 5 y 6, ya que las estructuras de las curvas correspondientes a estas tres generaciones son muy semejantes solamente que a diferentes escalas.

También usando la secuencia de Fibonacci [53], encontramos un número de picos resonantes dentro de las bandas parecido al encontrado en el caso periódico solo que la conductancia es menor, debido a que hay regiones donde las barreras tienen el doble de ancho y el número de pozos se mantiene igual.

Con respecto a la Fig. 3.23, las gráficas de arriba muestran los contornos para la estructura Thue-Morse, mientras que las de abajo son las respectivas para la estructura periódica. El color gris corresponde a transmitancia cero y el rojo a transmitancia uno. Una vez más se observa la simetría propia de este sistema. Y también, los dos sistemas muestran un comportamiento similar, aunque el sistema cuasirregular se ve con más desorden ya que las curvas que se forman presentan más ruido, es decir no se ven tan definidas como para

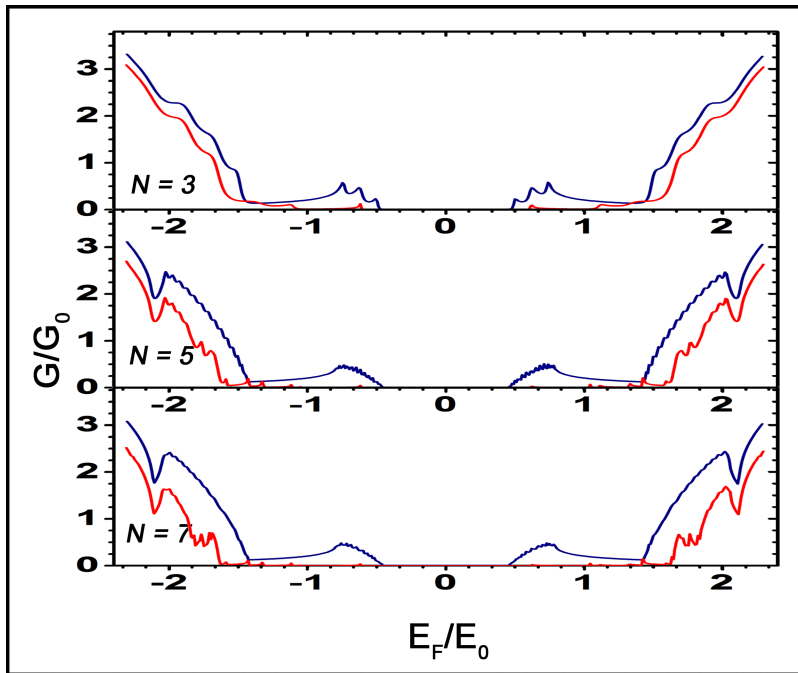


Figura 3.21: Conductancia vs Energía, generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$  para un sistema periódico (línea azul) y sistema aperiódico Thue-Morse (línea roja).

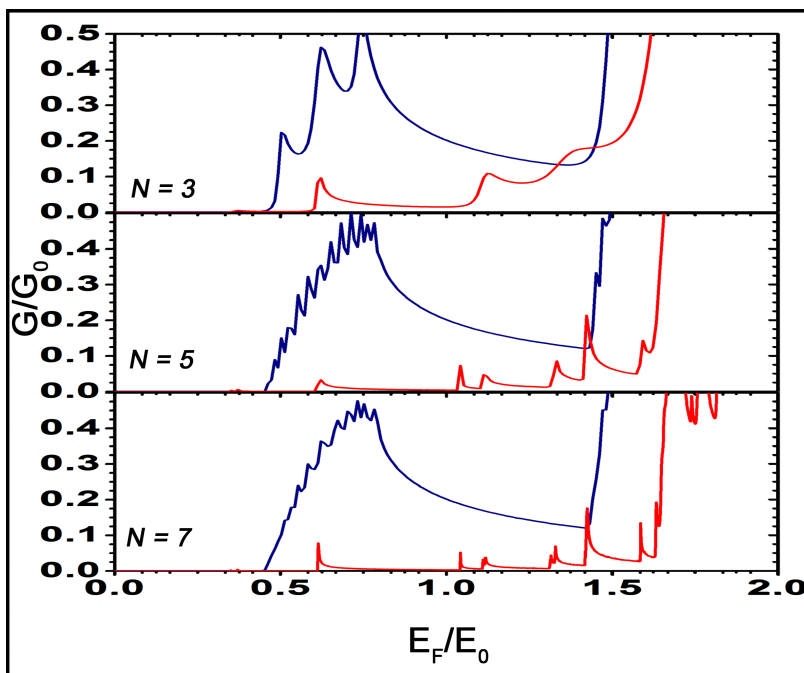


Figura 3.22: Gráfica detallada de la Conductancia vs Energía, generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$  para un sistema periódico (línea azul) y sistema aperiódico Thue-Morse (línea roja).

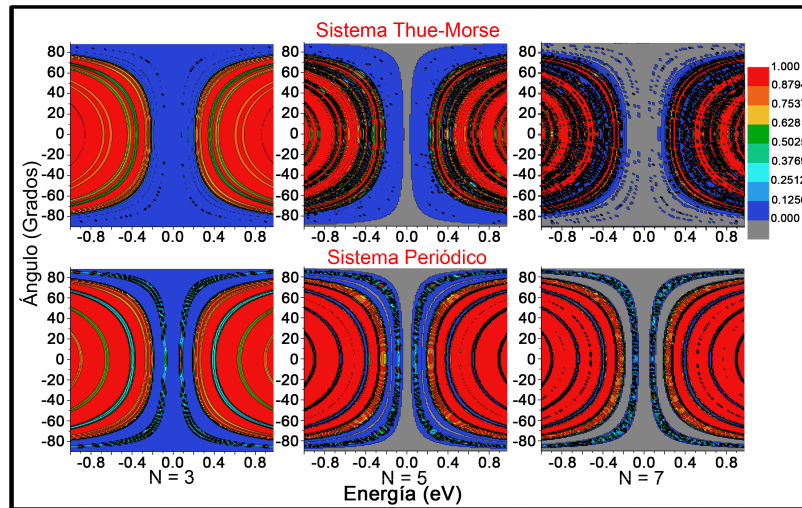


Figura 3.23: Contornos de Transmisión, generaciones  $N = 3, 5, 7$  para el sistema aperiódico Thue-Morse (Arriba) y para un sistema periódico (Abajo).

el caso periódico.

### 3.2.3 Estados Ligados

El espectro de los estados acotados como función del vector  $k_y$  se ilustra en la Fig. 3.13, la anchura de los pozos y las barreras es  $d_b = d_w = 50a$ , se consideraron las generaciones 3, 5 y 7 de la estructura Thue-Morse. Aquí las líneas punteadas en color verde delimitan las regiones permitidas para los estados acotados. De esta manera, los estados acotados presentados en la Fig. 3.24 corresponden a las curvas de conductancia expuestas en la Fig. 3.21. Se puede observar más claramente la formación de las subbandas y la forma en la que se fragmenta el espectro a medida que se aumenta la generación.

Los límites para los estados acotados nos los impone la relación de dispersión, en este caso, cuadrática. Para la generación  $N = 3$  (primer fila) se ven algunas líneas para los dos casos, pero no nos muestran mucho el comportamiento de los sistemas. En la comparación se ve un comportamiento parecido. Es en la siguiente fila ( $N = 5$ ) se puede ver que para el caso cuasiperiódico se forman tres regiones dentro de las cuales se han formado subbandas. Y en la tercera fila son más nítidas estas tres bandas que ahora están más llenas, la región está más fragmentada. Para el caso periódico se ve cómo se va fragmentando toda la región permitida conforme se aumenta la generación.

De esta manera, los estados acotados presentados en la Fig. 3.24 corresponden a las curvas de conductancia expuestas en la Fig. 3.21. Se puede observar más claramente la formación de las subbandas y la forma en la que se fragmenta el espectro a medida que se aumenta la generación.



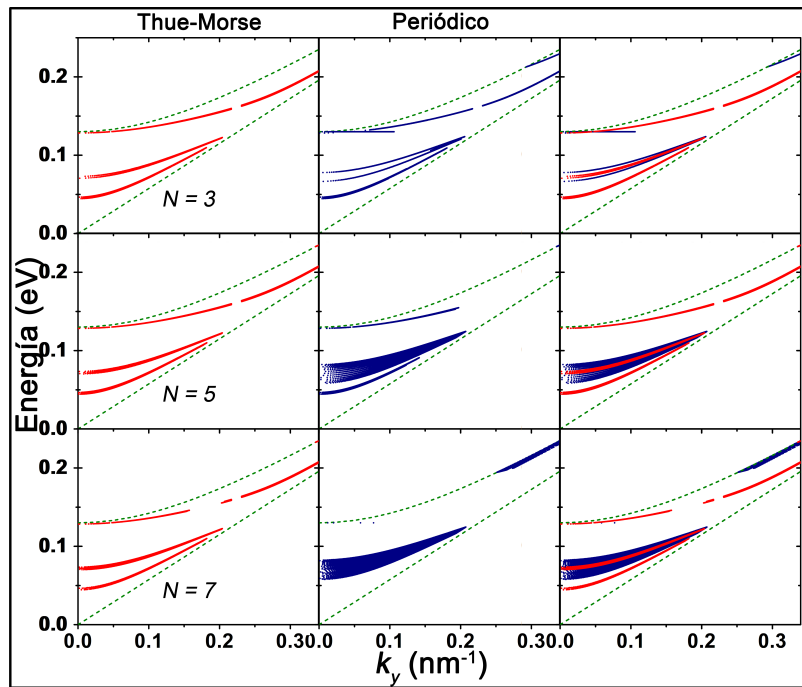


Figura 3.24: Espectro de estados acotados como función de  $k_y$ , generaciones  $N = 3, 5$  y  $7$  para el sistema aperiódico Thue-Morse (primer columna), un sistema periódico (segunda columna) y la comparación de los dos casos (tercer columna).





## 4. Conclusiones

En este trabajo resolvimos la ecuación de Dirac para una estructura aperiódica de grafeno formada siguiendo la regla de sustitución de Thue-Morse. Aplicamos el método de matriz de transferencia, con la finalidad de hacer cálculos numéricos de la Transmitancia en función de la energía y en función del ángulo, también para la conductancia en régimen lineal y así como de los estados acotados.

El computó se realizó tomando en cuenta dos sistemas. El primero es por medio de un potencial electrostático el cual solo mueve los conos de Dirac proporcionalmente a la intensidad de dicho campo, dejando así una relación de dispersión lineal. El segundo sistema es creando las barreras por medio del sustrato *SiC* el cual abre un gap de anchura  $2t'$ , el termino  $t'$  se considera un termino masivo y su relación de dispersión es parabólica. Analizando las gráficas hemos encontrado, fuerte fragmentación para la probabilidad de transmisión así como para las propiedades de transporte. Es de importancia, recalcar que el espectro se fragmenta no solo en las regiones donde se forman banda para el sistema periódico, sino que también en los gaps, esto es interesante por que este comportamiento es característico de sistemas desordenados.

Así mismo los picos en la conductancia obedecen la dinámica de fragmentación de las minibandas debido a la modulación aperiódica Thue-Morse. En particular en el caso electrostático la apertura y degeneración de las minibandas fragmentadas, mientras que para las barreras generadas por medio de sustratos la apertura, degeneración y oclusión de las minibandas son las que determinan la localización de los picos en la conductancia.

Por último, es importante mencionar que hacen falta más estudios teóricos y experimentales a través de otros mecanismos como campo magnético, campo electromagnético, estrés, funcionalización química, doble y triple capa de grafeno, etc. para llegar a tener un entendimiento más detallado del origen de las oscilaciones en la conductancia.



## 5. Investigación extra

Paralelamente al proyecto descrito en las páginas anteriores, estuve trabajando en otros temas. A continuación, muestro los cálculos numéricos para obtener la primera derivada y las derivadas de orden superior para funciones que no discretas. Éste método es de utilidad cuando se quiere derivar funciones en las cuales sólo tenemos una base de datos temporal.

### 5.1 Derivada numérica

La derivada de una función  $f$  en  $x_0$ , esta definido de la siguiente manera:

$$f'(x_0) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

Para valores pequeños de  $h$ , tenemos:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}, h \neq 0$$

En el cálculo numérico, podemos llegar a esta misma aproximación haciendo uso del polinomio de Taylor:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(\xi)}{2}(x - x_0)^2$$

Si se toma  $x = x_0 + h$ , entonces  $h = x - x_0$  y se reemplaza en el polinomio, se tiene que:

$$f(x + h) = f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{f''(\xi)}{2}h^2, x_0 < \xi < x_0 + h$$

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - Oh$$

se le denomina primera diferencia progresiva. De igual manera se obtiene la primera diferencia regresiva:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} + Oh$$

El error, en ambos casos es del orden de  $h$ .

### 5.1.1 Derivadas de orden superior

Las aproximaciones de la derivada de orden  $v$  de  $f$  la obtenemos calculando la primera derivada de la derivada de orden  $(v - 1)$  de  $f$ , es decir:

$$f^v(x) = f' f^{(v-1)}(x)$$

Así por ejemplo, si tomamos la formula regresiva para la segunda derivada regresiva tenemos:

$$\begin{aligned} f''(x_0) &\simeq \frac{f'(x_0) - f'(x_0 - h)}{h} \\ &\simeq \frac{\frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} - \frac{f(x_0 - h) - f(x_0 - 2h)}{h}}{h} \\ &= \frac{f(x_0) - 2f'(x_0 - h) + f(x_0 - 2h)}{h^2} \end{aligned}$$

Si continuamos aplicando la primera derivada, tendremos una formula general:

$$f^n(x) = \frac{\sum_{i=0}^n (-1)^i \binom{n}{i} f(x - h \cdot i)}{h^n}$$

Este resultado es tomando en cuenta el punto de interés y un punto más para la primera derivada. Para la derivada  $v$ -esima se ocuparán  $v$  puntos ya sea hacia adelante o hacia atrás según la derivada que estemos usando. El error en la primera derivada es del orden de  $h$ .

## 5.2 Derivación con tres puntos

El uso de mas puntos en la evaluación de la derivada producirá mayor exactitud; aunque esto implica mayor cantidad de evaluaciones funcionales y aumento de error de redondeo. Siguiendo las ideas de la sección anterior encontremos una formula general a partir del polinomio de Taylor para dos puntos más.

Sabemos que:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2}(x - x_0)^2 + \frac{f'''(\xi)}{6}(x - x_0)^3$$

Como se quiere determinar la formula de los tres puntos, se toma:  $x_0, x_1 = x_0 - h, x_2 = x_0 - 2h$

Usando la ecuación anterior, tenemos:

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2}h^2 - \frac{f'''(\xi)}{6}h^3$$

$$f(x_0 - 2h) = f(x_0) - f'(x_0)(2h) + \frac{f''(x_0)}{2}(2h)^2 - \frac{f'''(\xi)}{6}(2h)^3$$

O también:

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2}h^2 - Oh^3 \quad (5.1)$$

$$f(x_0 - 2h) = f(x_0) - 2f'(x_0)h + 2f''(x_0)(h)^2 - Oh^3 \quad (5.2)$$

(5.1) por 4 - (5.2) :

$$\begin{aligned} 4f(x_0 - h) &= 4f(x_0) - 4f'(x_0)h + 2f''(x_0)h^2 \\ -f(x_0 - 2h) &= -f(x_0) + 2f'(x_0)h - 2f''(x_0)(h)^2 \end{aligned}$$

$$4f(x_0 - h) - f(x_0 - 2h) = 3f(x_0) - 2f'(x_0)h$$

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 - 2h) - 4f(x_0 - h) + 3f(x_0)}{2h} \quad (5.3)$$

$$f''(x_0) = \frac{\frac{f(x_0 - 4h) - 4f(x_0 - 3h) + 3f(x_0 - 2h)}{2h} - 4\frac{f(x_0 - 3h) - 4f(x_0 - 2h) + 3f(x_0 - h)}{2h} + 3\frac{f(x_0 - 2h) - 4f(x_0 - h) + 3f(x_0)}{2h}}{2h}$$

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 - 4h) - 4f(x_0 - 3h) + 3f(x_0 - 2h) - 4f(x_0 - 3h) + 4 \cdot 4f(x_0 - 2h) - 4 \cdot 3f(x_0 - h) + 3f(x_0 - 2h) - 3 \cdot 4f(x_0 - h) + 3 \cdot 3f(x_0)}{(2h)^2}$$

$$f''(x_0) = \frac{1^2f(x_0 - 4h) - 4 \cdot 2f(x_0 - 3h) + 3 \cdot 2f(x_0 - 2h) + 4^2f(x_0 - 2h) - 4 \cdot 3 \cdot 2f(x_0 - h) + 3^2f(x_0)}{(2h)^2}$$

La forma me recuerda a un trinomio al cuadrado:

$$(a + b + c)^2 = a^2 + 2a(b + c) + (b + c)^2$$

$$(a + b + c)^2 = a^2 + 2ab + 2ac + b^2 + 2bc + c^2$$

Cuando tenemos un trinomio elevado a un factor  $n$  se obtienen los coeficientes con el coeficiente trinomial:

Donde  $\binom{n}{ij}$ , es el coeficiente trinomial, y es igual a  $\binom{n}{ij} = \frac{n!}{i!j!(n-i-j)!}$ , con  $i+j \leq n$ .

Entonces:

$$(a+b+c)^2 = \binom{2}{20}a^2 + \binom{2}{11}ab + \binom{2}{10}ac + \binom{2}{02}b^2 + \binom{2}{01}bc + \binom{2}{00}c^2$$

o

$$(a+b+c)^2 = \sum_{i=0}^2 \sum_{j=0}^{2-i} (a)^i (b)^j (c)^{2-i-j} \binom{2}{ij} \quad (5.4)$$

Podemos demostrar (5.4) de la siguiente manera:

$$(a+(b+c))^n = \sum_{i=0}^n \binom{n}{i} a^i (b+c)^{n-i}$$

y para  $(b+c)^{n-i}$ :

$$(b+c)^{n-i} = \sum_{j=0}^{n-i} \binom{n-i}{j} b^j (c)^{n-i-j}$$

juntando ambos terminos:

$$(a+b+c)^n = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^{n-i} a^i b^j c^{n-i-j} \binom{n}{i} \binom{n-i}{j}$$

donde

$$\binom{n}{i} \binom{n-i}{j} = \frac{n!}{i!(n-i)!} \cdot \frac{(n-i)!}{j!(n-i-j)!} = \frac{n!}{i!j!(n-i-j)!}$$

por lo tanto

$$(a+b+c)^n = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^{n-i} a^i b^j c^{n-i-j} \binom{n}{ij}$$

Con:

$$(1+(-4)+3)^2 = 1^2 + 2(1)(-4) + 2(1)(3) + (-4)^2 + 2(-4)(3) + 3^2$$

o también:

$$(1+(-4)+3)^2 = \sum_{i=0}^2 \sum_{j=0}^{2-i} (-4)^j (3)^{2-i-j} \binom{2}{ij}$$

y así se puede escribir una forma general para  $f^{(2)}$

$$f^{(2)}(x) = \frac{\sum_{i=0}^2 \sum_{j=0}^{2-i} (-4)^j (3)^{2-i-j} \binom{2}{ij} f(x - (2i+j)h)}{(2h)^2}$$



$$f^{(n)}(x) = \frac{\sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n (-4)^j (3)^{n-i-j} \binom{n}{ij} f(x - (2i+j)h)}{(2h)^n} \quad (5.5)$$

Demostremos (5.5) por inducción:

- para  $n=1$

$$f^{(1)}(x) = \frac{\sum_{i=0}^1 \sum_{j=0}^1 (-4)^j (3)^{1-i-j} \binom{1}{ij} f(x - (2i+j)h)}{(2h)}$$

$$f^{(1)}(x) = \frac{\sum_{i=0}^1 3^{1-i} \binom{1}{i0} f(x - 2ih) + \sum_{i=0}^0 (-4) 3^{-i} \binom{1}{i1} f(x - (2i+1)h)}{(2h)}$$

$$f^{(1)}(x) = \frac{3^1 \binom{1}{00} f(x) + \binom{1}{10} f(x - 2h) + (-4) \binom{1}{01} f(x - h)}{(2h)}$$

- Suponiendo cierto  $f^{(n)}(x)$

$$D(f^n(x)) = D \left( \frac{\sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n (-4)^j (3)^{n-i-j} \binom{n}{ij} f(x - (2i+j)h)}{(2h)^n} \right) \quad (5.6)$$

$$\begin{aligned} &= 3 \left( \frac{\sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^{n-i} (-4)^j (3)^{n-i-j} \binom{n}{ij} f(x - (2i+j)h)}{(2h)^{n+1}} \right) \\ &- 4 \left( \frac{\sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^{n-i} (-4)^j (3)^{n-i-j} \binom{n}{ij} f(x - (2i+j+1)h)}{(2h)^{n+1}} \right) \\ &+ \left( \frac{\sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^{n-i} (-4)^j (3)^{n-i-j} \binom{n}{ij} f(x - (2i+j+2)h)}{(2h)^{n+1}} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left( \frac{\sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^{n-i} (-4)^j (3)^{n+1-i-j} \binom{n}{i,j} f(x - (2i+j)h)}{(2h)^{n+1}} \right) \\
&+ \left( \frac{\sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^{n-i} (-4)^{j+1} (3)^{n-i-j} \binom{n}{i,j} f(x - (2i+j+1)h)}{(2h)^{n+1}} \right) \\
&+ \left( \frac{\sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^{n-i} (-4)^j (3)^{n-i-j} \binom{n}{i,j} f(x - (2i+j+2)h)}{(2h)^{n+1}} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left( \frac{\sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^{n-i} (-4)^j (3)^{n+1-i-j} \binom{n}{i,j} f(x - (2i+j)h)}{(2h)^{n+1}} \right) \\
&+ \left( \frac{\sum_{i=0}^n \sum_{j=1}^{n+1-i} (-4)^j (3)^{n+1-i-j} \binom{n}{i,j-1} f(x - (2i+j)h)}{(2h)^{n+1}} \right) \\
&+ \left( \frac{\sum_{i=1}^{n+1} \sum_{j=0}^{n+1-i} (-4)^j (3)^{n+1-i-j} \binom{n}{i-1,j} f(x - (2i+j)h)}{(2h)^{n+1}} \right)
\end{aligned}$$

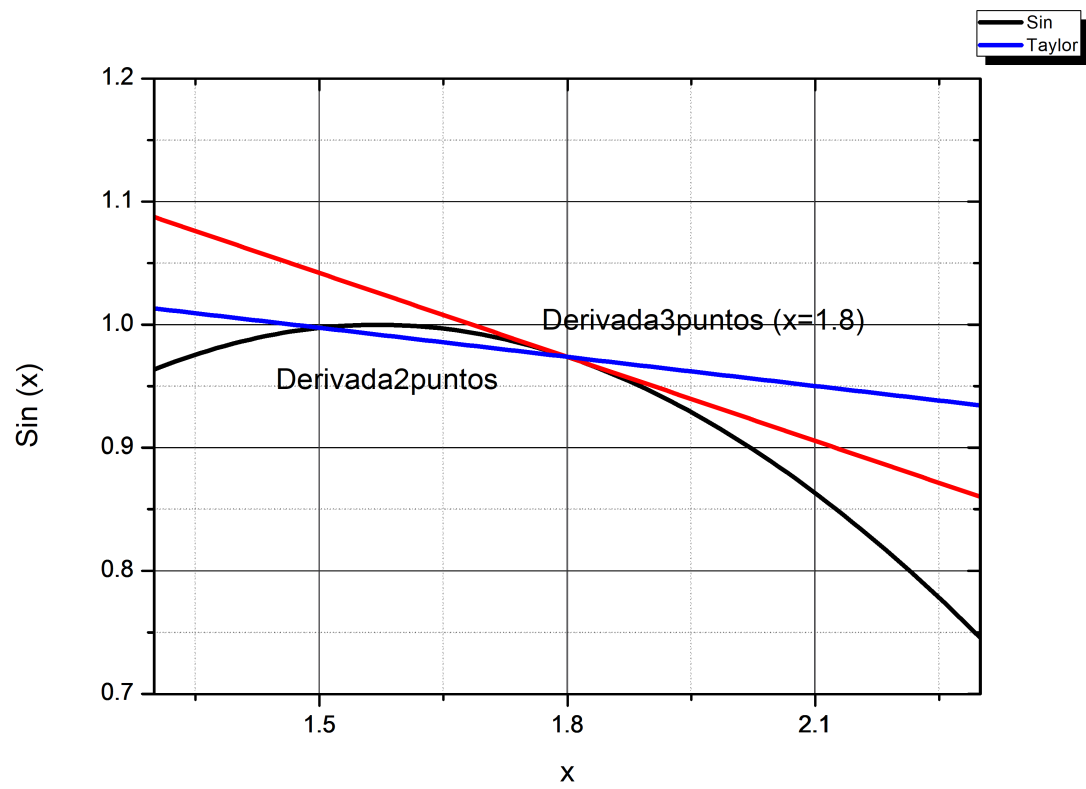
$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{(2h)^{n+1}} \left\{ \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (-4)^j (3)^{n+1-i-j} \left[ \binom{n}{ij} + \binom{n}{ij-1} + \binom{n}{i-1j} \right] f(x - (2i+j)h) + \right. \\
&+ \underbrace{(3)^{n+1} \binom{n}{00} f(x)}_{i=0, j=0} + \underbrace{(-4)(3)^n \binom{n}{01} f(x-h) + (-4)(3)^n \binom{n}{00} f(x-h)}_{i=0, j=1} + \\
&+ \underbrace{(3)^n \binom{n}{10} f(x-2h) + (3)^n \binom{n}{00} f(x-2h)}_{i=1, j=0} + \\
&+ \underbrace{\binom{n}{n0} f(x-2(n+1)h)}_{i=n+1, j=0} + \underbrace{(-4)^{n+1} \binom{n}{0n} f(x-(n+1)h)}_{i=0, j=n+1} \\
&\left. \binom{n}{ij} + \binom{n}{ij-1} + \binom{n}{i-1j} = \frac{n!}{i!j!(n-i-j)!} + \frac{n!}{i!(j-1)!(n+1-i-j)!} + \frac{n!}{(i-1)!j!(n+1-i-j)!} \right. \\
&= \frac{n! \cdot (n-i-j)}{i!j!(n-i-j) \cdot (n-i-j)!} + \frac{n! \cdot j}{i!j \cdot (j-1)!(n+1-i-j)!} + \frac{n! \cdot i}{i \cdot (i-1)!j!(n+1-i-j)!} \\
&= \frac{n!(n+1-i-j+i+j)}{i!j!(n+1-i-j)!} = \frac{(n+1)!}{i!j!(n+1-i-j)!} \\
&= \frac{\sum_{i=0}^{n+1} \sum_{j=0}^{n+1-i} (-4)^j (3)^{n+1-i-j} \binom{n+1}{ij} f(x - (2i+j)h)}{(2h)^{n+1}} = f^{(n+1)}(x)
\end{aligned}$$

### 5.3 Ejemplo

Para ilustrar el comportamiento de la derivada con tres puntos, analicemos algunas funciones simples.

Empezamos con la función  $\text{Sin}(x)$ : La primer gráfica muestra la función en el intervalo  $[-3\pi, 3\pi]$ . También en la gráfica podemos ver la aproximación con serie de Taylor (color azul) de la función. Las dos líneas (negra y azul) tienen escalas diferentes en la vertical, esto con el propósito de hacer notar las dos curvas. Si no se hiciera esto no se distinguirían una de la otra. Para la serie de Taylor se usó la derivada con tres puntos. Se usaron diez términos y con  $h = 0.0001$

Planeamos usar ésta y algunas otras definiciones de la derivada para optimizar los pesos de redes neuronales.





## Bibliografía

- [1] Novoselov, K. S., A. K. Geim, S. V. Mrozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva and A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
- [2] Novoselov, K. S., A. K. Geim, S. V. Mrozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos and A. A. Firsov, *Nature* **438**, 197 (2005).
- [3] Zhang, Y., Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, *Nature* **438**, 201 (2005).
- [4] Castro Neto, A. H., F. Guinea and N. M. R. Peres, *Phys. World* **19**, 33 (2006).
- [5] Katsnelson, M. I. *Eur. J. Phys.* **51**, 157 (2006).
- [6] Katsnelson, M. I. and K. S. Novoselov. *Sol. Stat. Comm.* **143**, 3 (2007).
- [7] Schedin, F., A. K. Geim, E. W. Hill S. V. Morozov, P. Blake, M. I. Katsnelson, and K. S. Novoselov, *Nat. Mater.* **6**, 652(2007).
- [8] Geim, A. K. and K. S. Novoselov, *Nat. Mater.* **6**, 183 (2007).
- [9] Hill, E. W., A. K. Geim, K. Novoselov, F. Schedin, and P. Blake, *IEEE Trans. Magn.* **42**, 2694 (2006).
- [10] Ohishi, M., M. Shiraishi, R. Nouchi, T. Nozaki, T. Shinjo, and Y. Suzuki, *Jap. J. Appl. Phys.* **46** L605-L606 (2007).
- [11] Wallace, P. R., *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947).
- [12] Gusynin, V. P. and S. G. Sharapov, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146801 (2005).
- [13] Peres, N. M. R., F. Guinea, and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. B* **73**, 125411 (2006).

- [14] Calogeracos, A., and N. Dombey, *Contemp. Phys.* **40**, 313-321 (1999).
- [15] Itzykson, C. and J.-B. Zuber. *Quantum Field Theory.* (2006).
- [16] Katsnelson, M. I., K. S. Novoselov, and A. K. Geim., *Nat. Phys.* **2**, 620 (2006).
- [17] Bai, C. and X. Zhang, *Phys. Rev. B* **76**, 75430 (2007).
- [18] Vogt, P., P. De Padova, C. Quaresima, J. Avila, E. Frantzeskakis, M. C. Asensio, A. Resta, B. Ealet and G. Le Lay, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 155501 (2012).
- [19] Xu M, Liang T, Shi M, and Chen H., *Chemical Reviews* **113**, 3766-3798 (2013).
- [20] Jinying Wang, Shibin Deng, Zhongfan Liu, and Zhirong Liu, *National Science Review*, **2**, 22-39 (2015).
- [21] Shechtman, D., I. Blech, D. Gratias, and J. W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
- [22] Shechtman, D. and I. Blech, *Metall. Trans. A* **16**, 1005 (1985).
- [23] Levine, D. and P. J. Steinhardt, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2477 (1984).
- [24] Maciá, E., *Rep. Prog. Phys.* **69**, 397 (2005).
- [25] Lei, H., J. Chen, G. Nouet, S. Feng, Q. Gong, and X. Jiang, *Phys. Rev. B.* **75**, 205109 (2007).
- [26] Moretti, L., I. Rea, L. De Stefano, and I. Rendina, *Appl. Phys. Lett.* **90**, 2191112 (2007).
- [27] Agarwal, V. and M. E. Mora-Ramos, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **40**, 3203 (2007).
- [28] King, P. D. C. and T. J. Cox, *J. Appl. Phys.* **102**, 014902 (2007).
- [29] Merlin, R., K. Bajema, R. Clarke, F. -Y. Juang and P.K. Bhattacharya, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1768 (1985).
- [30] K. S. Novoselov, V. I. Falko, L. Colombo, P. R. Gellert, M. G. Schwab, and K. Kim, *Nature*, 490 (2012).
- [31] A. C. Ferrari, F. Bonaccorso, V. Fal'ko, K. S. Novoselov, S. Roche, P. Boggild, S. Borini, F. H. L. Koppens, V. Palermo, N. Pugno, J. A. Garrido, R. Sordan, A. Bianco, L. Ballerini, M. Prato, E. Lidorikis, J. Kivioja, C. Marinelli, T. Ryhanen, A. Morpurgo, J. N. Coleman, V. Nicolosi, L. Colombo, A. Fert, M. Garcia-Hernandez, A. Bachtold, G. F. Schneider, F. Guinea, C. Dekker, M. Barbone, Z. Sun, C. Galiotis, A. N. Grigorenko, G. Konstantatos, A. Kis, M. Katsnelson, L. Vandersypen, A. Loiseau, V. Morandi, D. Neumaier, E. Treossi, V. Pellegrini, M. Polini, A. Tredicucci,

- G. M. Williams, B. Hee Hong, J.- H. Ahn, J. Min Kim, H. Zirath, B. J. van Wees, H. van der Zant, L. Occhipinti, A. Di Matteo, I. A. Kinloch, T. Seyller, E. Quesnel, X. Feng, K. Teo, N. Rupesinghe, P. Hakonen, S. R. T. Neil, Q. Tannock, T. Lofwander, and J. Kinaret, *Nanoscale* **7**, 4598 (2015).
- [32] H. García-Cervantes, L. M. Gaggero-Sager, O. Sotolongo-Costa, G. G. Naumis, and I. Rodríguez-Vargas, *AIP Advances* **6**, 035309 (2016).
- [33] Barbier, M., P. Vasilopoulos and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B.* **81**, 075438 (2010).
- [34] Wang, L. G. and S. Y. Zhu, *Phys. Rev. B.* **81**, 205444 (2010).
- [35] Sena, S. H. R., J. M. Pereira Jr, G. A. Farias, M. S. Vasconcelos and E. L. Albuquerque, *J. Phys.:Condens. Matter* **22**, 465305 (2010).
- [36] Sun, L., C. Fang, Y. Song and Y. Guo, *J. Phys.:Condens. Matter* **22**, 445303 (2010).
- [37] Mukhopadhyay, S., R. Biswas and C. Sinha, *Phys. Status Solidi B.* **247**, 342 (2010).
- [38] Zhao, P. L. and X. Chen, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 182108 (2011).
- [39] Yu-Ping,Z., G. Ying and Z. Hui-Yun, *J. Phys D:Appl. Phys.* **45**, 055101 (2012).
- [40] Ma, T., C. Liang, L. G. Wang and H. Q. Lin, *Appl. Phys. Lett.* **100**, 252402 (2012).
- [41] Xu, Y., Jianfei Zou and Guojun Jin, *J. Phys.: Condens. Matter* **25**, 245301(2013).
- [42] H. García-Cervantes, L. M. Gaggero-Sager, O. Sotolongo-Costa, G. G. Naumis, and I. Rodríguez-Vargas, *AIP Advances* textbf6, 035309 (2016).
- [43] Yeh, P., *Optical waves in layered media* (Wiley-Interscience, 2005).
- [44] Markos, P., and C. M. Soukoulis, *Wave Propagation: From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials* (Princeton University Press, 2008).
- [45] Griffiths, D. J. and C. A. Steinke, *Am. J. Phys.* **69**, 2 (2001).
- [46] Viana Gomes, J. and N. M. R. Peres, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 325221 (2008).
- [47] Chau Nguyen, H. and V. Lien Nguyen, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 045305 (2009).
- [48] Levich, B. G., *Curso de Física Teórica Volumen 3 Mecánica Cuántica* (Ed. Reverté, 1976).
- [49] Datta, S., *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, 1995).

- 
- [50] Rodríguez-Vargas, I., J. Madrigal-Melchor y O. Oubram, *J. Appl. Phys.* **112**, 073711 (2012);.
- [51] Zhou, S. Y., G.-H. Gweon, A. V. Fedorov, P. N. First, W. A. de Heer, D. -H. Lee, F. Guinea, A. H. Castro Neto, and A. Lanzara, *Nat. Mater.* **6**, 770 (2007).
- [52] Rodríguez González, R., *Tesis de Maestría: Estudio de propiedades de transmisión, transporte y estructura de niveles de sistemas multicapas Cantor basados en grafeno* (Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, 2013).
- [53] García Cervantes, H., *Tesis de Maestría: Propagación de electrones de Dirac en estructuras multicapas Fibonacci*. (Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, 2013).





UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL  
ESTADO DE MORELOS



Instituto de  
Investigación en  
Ciencias  
Básicas y  
Aplicadas

**INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS**

Defensoría de Posgrado en Ingeniería y Ciencias Aplicadas



"2019, a 100 años del asesinato del General Emiliano Zapata Salazar"

Cuernavaca, Morelos, a 07 de marzo de 2019.

**DR. ROSENBERG JAVIER ROMERO DOMÍNGUEZ**  
**COORDINADOR DEL POSGRADO**  
**EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS**  
**P R E S E N T E**

Atendiendo a la solicitud para emitir DICTAMEN sobre la revisión de la TESIS titulada "Propiedades de transporte en Thue-Morse en grafeno" que presenta el alumno **ENRIQUE ARTURO CARRILLO DELGADO**, para obtener el título de **DOCTORADO EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS** con opción terminal en **TECNOLOGÍA ELÉCTRICA**.

Nos permitimos informarle que nuestro voto es:

NOMBRE	DICTAMEN	FIRMA
DR. GENNADIY BURLAK	Aprobado	
DR. VOLODYMYR GRIMALSKY	Aprobado	
DR. ANDREY LEZNOV	Aprobado	
DR. ISAAC RODRÍGUEZ VARGAS Universidad Autónoma de Zacatecas (UAZ)	Aprobado	
DR. OUTMANE OUBRAME Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería (FCQel)	Aprobado	
DR. JOSÉ ALFREDO HERNÁNDEZ PÉREZ	Aprobado	
DR. LUIS MANUEL GAGGERO SAGER	Aprobado	

**PLAZO PARA LA REVISIÓN 20 DÍAS HÁBILES (A PARTIR DE LA FECHA DE RECEPCIÓN DEL DOCUMENTO)**

**NOTA. POR CUESTION DE REGLAMENTACIÓN LE SOLICITAMOS NO EXCEDER EL PLAZO SEÑALADO, DE LO CONTRARIO LE AGRADECEMOS SU ATENCIÓN Y NUESTRA INVITACIÓN SERÁ CANCELADA.**