



Universidad Autónoma de Zacatecas  
"Francisco García Salinas"  
Unidad Académica de Física

---



**Resonancias Fano en superredes basadas en bicapa de grafeno**

# **T E S I S**

Que para obtener el grado de  
**DOCTOR EN CIENCIAS BÁSICAS**  
(Con Orientación en Física)

PRESENTA

**M. en C. José Alberto Briones Torres**

DIRECTOR DE TESIS

**Dr. Isaac Rodríguez Vargas**

Zacatecas, México

Diciembre de 2018

## Agradecimientos

Agradezco infinitamente a la casa de estudios del Estado de Zacatecas, la Universidad Autónoma de Zacatecas que me acogió durante toda mi carrera profesional, especialmente a la Unidad Académica de Física donde me gradué de Licenciado en Física y posteriormente realicé la Maestría en Ciencias Físicas, y donde ahora doy por terminado mi Doctorado en Ciencias Básicas con Orientación en Física, gracias por recibirme todos estos años.

Agradezco de igual manera al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por el soporte económico a través de su Programa Nacional de Posgrados de Calidad (PNPC), en particular al programa de Doctorado en Ciencias Básicas con número PNPC 3911, mediante la beca nacional 277424.

Mil gracias Dios por darme la oportunidad de concluir una de las etapas más importantes de mi carrera profesional y de mi vida. Hoy concluye el último peldaño de mi carrera profesional, estoy listo para dejar de ser un estudiante y ahora poner en práctica todo lo aprendido, no sin antes agradecer infinitamente a todos las personas que se cruzaron en esta travesía escolar.

Agradezco inmensamente el apoyo de mis padres Leticia Torres Murillo y José Briones Aguilar, los dos pilares más fuertes que tengo y donde siempre me sostuve, por ellos soy lo que soy, nunca podré pagarles todo lo que han hecho por mi. Agradecer a mis hermanos Eddy, Ricky y Carlitos por los buenos y grandes momentos que siempre disfrutamos cada semana, por las tardes de fútbol, de charlas amenas, maravillosa familia.

De igual manera, con un grande y profundo amor, quiero darle las gracias a mi esposa Claudia, quién ha aguantado todos estos 4 años de Doctorado, mi estrés, mis cambios de humor, y el fuerte carácter por la presión del trabajo. A mis hijos Kenia Zoé y Pol Franco por la inmensas alegrías

de todos los días, por la simple razón de sonreír al verme y con ello darle paciencia y calma a mi día.

Al Dr. Isaac Rodríguez Vargas, uno de mis mejores maestros, una excelente persona y un gran amigo, gracias por tus enseñanzas, por tu paciencia y por estar siempre pendiente. Francamente eres mi modelo a seguir. Muchísimas gracias.

Gracias a todas las personas que formaron parte de este largo camino, familia, profesores y amigos, sin duda alguna cada uno puso su granito de arena en la obtención de este logro.

*A mis hijos Kenia Zoé y Pol Franco*



## Resumen

La doble capa de grafeno es un material formado por dos láminas de grafeno superpuestas una encima de la otra ya sea en un arreglo tipo AA, tipo AB o Bernal, o bien rotadas entre sí un ángulo cualquiera. El arreglo más estable es el arreglo Bernal. A bajas energías presenta una relación de dispersión parabólica, esto hace que los electrones se comporten como partículas quirales masivas. Este tipo de partícula no tiene contraparte en la electrodinámica cuántica. Una de sus características especiales es que sus funciones de onda en regiones multicapas son una combinación lineal de estados propagantes y evanescentes-divergentes, esto abre la posibilidad de la aparición de resonancias Fano, un fenómeno que ocurre por la interacción entre estados discretos y continuos típicamente exclusivo de la óptica por la necesidad de una fuente de luz. Recientemente se ha demostrado teóricamente que en la propagación de electrones en sistemas multicapas basadas en doble capa de grafeno aparecen resonancias Fano sin la necesidad de una fuente de luz, y que éstas son altamente sensibles al ángulo de incidencia de los electrones y al tamaño del sistema.

El trabajo de tesis está formado por tres partes. En la primera parte se analizan a detalle dos métodos usados para el cálculo de las propiedades de transmisión y transporte en sistemas multicapas basados en doble capa de grafeno, la matriz de transferencia y el método de la matriz híbrida. La matriz de transferencia presentó inestabilidades numéricas por la manera en que se realizan los productos matriciales dentro del método, presentando el ya conocido problema  $\omega d$ . Por otro lado la matriz híbrida independientemente de la modulación de los parámetros del sistema siempre mostró resultados fiables.

En la segunda parte damos una explicación a detalle de las resonancias Fano en sistemas de una y dos barreras, así como de superredes basadas en doble capa de grafeno. Estudiamos las propiedades de transmisión, particularmente la transmitancia como función de la energía, variando los parámetros del sistema como ángulo de incidencia de los electrones, anchos de barreras y po-

zos, alto de barreras y número de barreras. Hemos dejado claro que las resonancias Fano además de aparecer a pequeños ángulos de incidencia y ser susceptibles al tamaño del sistema, pueden interactuar las minibandas naturales de la superred y formar nuevos tipos de resonancias, conocidas como resonancias híbridas. Si bien la transmitancia no es una cantidad física que pueda ser medida en laboratorio, procuramos también calcular las propiedades de transporte, especialmente la conductancia en el régimen lineal, y logramos identificar de manera cualitativa en que parte de las curvas de conductancia se encuentran las resonancias Fano y de que manera contribuyen a las propiedades de transporte.

Y por último en la tercera parte se estudiaron los efectos de la no parabolicidad y la apertura del bandgap sobre las resonancias Fano. Para ello se utilizó el Hamiltoniano a cuatro bandas. Encontramos que bajo estos dos efectos las resonancias Fano se ven fuertemente afectadas inclusive llegan a ser destruidas.

## Abstract

Bilayer graphene is a material formed by two sheets of graphene superimposed one on top of the other in an arrangement type AA, type AB or Bernal, or rotated together at any angle. The most stable arrangement is the Bernal arrangement. At low energies it presents a parabolic dispersion relation, this makes that electrons behave like massive chiral particles. This type of particle has no counterpart in quantum electrodynamics. One of its special characteristics is that its wave functions in multibarrier regions are a linear combination of propagating and evanescent-divergent states. This opens the possibility of the appearance of Fano resonances, a phenomenon that occurs due to the interaction between discrete and continuum states. This phenomenon is typical in optics due to light sources (continuum states). Recently, it has been demonstrated theoretically that Fano resonances appear in the transmission properties of bilayer graphene without the need of a light source, and that these are highly sensitive to the angle of incidence of electrons and the size of the system.

The thesis work consists of three parts. In the first part, two methods used to calculate transmission and transport properties in multibarrier systems based on bilayer graphene, the transfer matrix and the hybrid matrix method, are analyzed in detail. The transfer matrix presented numerical instabilities presenting in the well-known  $\Omega d$  problem. On the contrary, the hybrid matrix always gave reliable results, regardless of the modulation of the system parameters.

In the second part, we give a detail description of Fano resonances in systems of one and two barriers, as well as superlattices. We study the transmission properties, particularly transmittance as a function of energy, varying the structural parameters of the system such as the angle of incidence of electrons, barriers and wells widths, barriers heights and number of barriers. We show that Fano resonances arise at small angles of incidence and that they are quite sensitive to size and the structural parameters of the system. Furthermore, Fano resonances can interact with the natural energy minibandas of superlattices giving rise to new type of resonances, called hybrid resonances. As the transmittance is not a simple physical measurable quantity we extended our study to



the transport properties, particularly the linear-regime conductance. Despite conductance is an average over all conduction channels we were able to identify the contribution of Fano resonances on this quantity. We consider that this result is relevant because it opens the possibility to test experimentally this rather exotic phenomenon in bilayer graphene.

Finally, in the third part, the effects of the nonparabolicity and the opening of the bandgap on the Fano resonances were studied. A four-band Hamiltonian was used to incorporate nonparabolicity and bandgap opening. We find that under these two effects Fano resonances are strongly affected and even destroyed.

# Índice general

<b>Carta Circular</b>	<b>III</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>V</b>
<b>Dedicatoria</b>	<b>VII</b>
<b>Resumen</b>	<b>IX</b>
<b>Abstract</b>	<b>XI</b>
<b>Índice general</b>	<b>XIII</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>XIII</b>
<b>Lista de Tablas</b>	<b>XV</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Materiales Bidimensionales: El Grafeno . . . . .	1
1.2. Doble capa de grafeno: Un material cuasi-bidimensional . . . . .	5
1.3. Efecto Hall Cuántico Entero . . . . .	10
1.4. Estados Invisibles . . . . .	12
1.5. Resonancias Fano . . . . .	14

1.6. Resonancias Fano y la doble capa de grafeno . . . . .	21
1.7. Motivación . . . . .	25
1.8. Objetivo Principal . . . . .	27
1.9. Metas . . . . .	28
<b>2. Metodología</b>	<b>29</b>
2.1. Matriz de transferencia para el Hamiltoniano a dos bandas . . . . .	30
2.2. Matriz de transferencia para el Hamiltoniano a cuatro bandas . . . . .	34
2.3. Relación entre la matriz híbrida y la matriz de transferencia . . . . .	38
2.4. Matriz híbrida para el Hamiltoniano a dos bandas . . . . .	40
2.5. Matriz híbrida para el Hamiltoniano a cuatro bandas . . . . .	48
2.6. Conductancia en el régimen lineal . . . . .	53
<b>3. Resultados</b>	<b>57</b>
3.1. El problema $\Omega d$ en superredes de doble capa de grafeno . . . . .	57
3.2. Resonancias Fano en superredes de doble capa de grafeno . . . . .	66
3.2.1. Sistema de una barrera de potencial . . . . .	66
3.2.2. Sistema de dos barreras de potencial . . . . .	71
3.2.3. Superred periódica . . . . .	76
3.3. El efecto de la noparabolicidad y la apertura de bandgap . . . . .	81
3.3.1. Efecto de la noparabolicidad . . . . .	81
3.3.2. Efecto de la apertura del bandgap . . . . .	85
<b>4. Conclusiones</b>	<b>89</b>
<b>5. Perspectivas</b>	<b>91</b>
<b>A. Forma lineal asociada del operador SLM</b>	<b>93</b>
<b>B. Estados Confinados en una barrera rectangular basada en doble capa de grafeno</b>	<b>95</b>

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	xv
<b>Referencias</b>	<b>99</b>
<b>Publicaciones</b>	<b>105</b>



# Índice de figuras

1.1.	Los diferentes alótropos del Carbono. . . . .	1
1.2.	(a) Estructura cristalina del grafeno con átomos $A(B)$ mostrados como círculos de color blancos (negros), que a su vez muestran las subredes triangulares interpenetradas. El rombo sombreado muestra la celda unitaria donde $a_1$ y $a_2$ son los vectores de red. (b) Red recíproca del grafeno, $b_1$ y $b_2$ son los vectores recíprocos. La zona hexagonal sombreada es la primer zona de Brillouin con $\Gamma$ indicando el centro de la zona, $K_+$ y $K_-$ son los puntos de Dirac. . . . .	3
1.3.	(a) Bandas de energía cerca del nivel de Fermi en el grafeno. Las bandas de conducción y valencia se cruzan en los puntos $K'$ y $K$ , conocidos como puntos de Dirac. (b) Bandas de energía cónicas cercas de los puntos de Dirac $K'$ y $K$ . . . . .	4
1.4.	(a) Doble capa de grafeno desde una vista superior, Los átomos $A1$ y $B1$ están representados por círculos de color blanco y negro, respectivamente, en la primer lámina de grafeno, mientras que en la lámina rotada los átomos $A2$ y $B2$ son los círculos negros y grises, respectivamente. El rombo sombreado representa la celda unitaria. (b) Doble capa de grafeno en su forma cristalina, existen ciertas interacciones entre los átomos de ambas láminas representados por las letras $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_3$ y $\gamma_4$ . . . . .	5
1.5.	Estructura de bandas de la doble capa de grafeno, en el zoom se muestran las bandas a bajas energías, éstas bandas se tocan en los puntos $K_+$ y $K_-$ y son parabólicas. . . . .	7

- 1.6. efecto Hall cuántico entero para: (a) semiconductores convencionales y (b) doble capa de grafeno. Las mesetas en la conductividad Hall ocurren en valores de  $(ge^2/h)N$ , donde  $N$  es un entero,  $g$  es la degeneración del sistema. Los niveles de Landau como función de la concentración de carga  $n$  se muestran en azul (electrones) y naranja (huecos). . . . . 11
- 1.7. Invisibilidad de las resonancias de transmisión en uniones balísticas  $p-n-p$  debido al desacople de estados. (a) Para un potencial tipo función paso, el acoplamiento del pseudoespín es cero a incidencia normal. Esto lleva a (b) la formación de estados confinados dentro de la barrera causando resonancias estrechas en la transmitancia. El efecto de invisibilidad se muestra en (c) para un potencial de barrera tipo delta que tiene un estado confinado que produce una resonancia de transmisión en  $\epsilon = \epsilon_0$ . 13
- 1.8. (a) Transmitancia y (b) conductancia para una barrera parabólica con  $V(x) = -\frac{1}{2}mw^2x^2$ . Se muestran las resonancias correspondientes a los dos primeros estados acotados del oscilador armónico. Se puede ver que a incidencia normal  $q_y = 0$  los estados confinados son invisibles por la barrera debido al desajuste de quiralidad con los estados continuos fuera de la barrera. Las resonancias en la conductancia muestran la singularidad de raíz cuadrada. . . . . 15
- 1.9. Espectro de absorción para el gas noble Xenón encontrado por Beutler en 1935. . . 16
- 1.10. Representación esquemática de una resonancia Fano como el acople entre un estado discreto y uno continuo. . . . . 16
- 1.11. Perfiles Fano normalizados al factor  $1/(1+q^2)$  para  $q = 0$ ,  $q = 1$  y  $q \rightarrow \infty$ . . . . . 18
- 1.12. (a) Diagrama de dos osciladores acoplados, uno de ellos sometido a una fuerza periódica externa. (b) Dependencia resonante de la amplitud del oscilador armónico forzado, (c) Dependencia resonante de la amplitud del segundo oscilador armónico. . 19

1.13. Variación del parámetro de asimetría  $q$ . La fila superior muestra los resultados obtenidos en laboratorio y la fila inferior los resultados teóricos para el espectro de absorción de un punto cuántico con incidencia de luz láser a diferentes potencias. Se puede observar que con el incremento de la potencia del láser el perfil pasa de ser simétrico a ser asimétrico. . . . . 20

1.14. Diagrama de un dispositivo de doble puerta basado en doble capa de grafeno. (a) Fonón óptico simétrico en una doble capa de grafeno prístino con un arreglo AB y con momento dipolar cero. (b) Dopaje de cargas inducidas por el campo eléctrico normal y que lleva a una actividad infrarroja en el fonón óptico. (c) Estructura de bandas de la Doble capa de grafeno prístino sin bandgap. (d) Un campo eléctrico normal genera un bandgap en la estructura de bandas de la doble capa de grafeno. (e) Diagrama de la resonancia Fano que describe las transiciones infrarrojas interferentes a los estados electrónicos continuos de fonones discretos y continuos. (f) Imagen de microscopio óptico de un dispositivo típico de doble puerta basado en doble capa de grafeno. (g) El ilustración del dispositivo anterior visto lateralmente. (h) Espectro de absorción infrarroja de la doble capa de grafeno prístino, la absorción es relativamente plana y no hay resonancias. (i) Espectro de absorción infrarroja de la doble capa de grafeno con un campo eléctrico incidiendo normalmente, aquí el dopaje es cero y el bandgap es de 190 meV. La resonancia del fonón en 195 meV aparece como una caída en lugar de un pico de absorción debido a la interferencia Fano. . . . . 22

1.15. Efecto Túnel. (a) En física clásica si se hace incidir un electrón a sobre una barrera, si la energía del electrón es menor al de la barrera no puede cruzar. (b) En la mecánica cuántica la dualidad onda-partícula abre la posibilidad de que el electrón cruce la barrera. (c) En la electrodinámica cuántica un electrón a velocidades cercanas a las de la luz siempre cruzará la barrera. . . . . 24



1.16. Diagrama Esquemático para (a) el perfil de bandas en sistemas de dos barreras en doble capa de grafeno sin campo eléctrico externo y (b) bajo la aplicación de un campo eléctrico externo. . . . . 25

1.17. Transmitancia como función de la energía para una barrera en doble capa de grafeno con un ancho de  $b = 10$  nm y alto  $V_0 = 50$  meV. (a) Sin la aplicación de un campo eléctrico externo, para ángulos de incidencia:  $\theta_0 = 0^\circ$  (línea sólida negra),  $\theta_0 = 1^\circ$  (línea roja punteada),  $\theta_0 = 10^\circ$  (línea discontinua azul) y  $\theta_0 = 30^\circ$  (línea de puntos y trazos verde). (b) Bajo un campo eléctrico externo y para un ángulo de incidencia  $\theta_0 = 10^\circ$ . para  $E' = 0$  V/m (línea sólida negra),  $E' = 5 \times 10^5$  V/m (línea punteada roja),  $E' = 1 \times 10^6$  V/m (línea discontinua azul) y  $E' = 5 \times 10^6$  V/m (línea de puntos y trazos verde). . . . . 26

1.18. Transmitancia como función de la energía para dos barreras en doble capa de grafeno con un ancho de barreras de  $b = 10$  nm, ancho de pozo de  $a = 10$  nm y alto  $V_0 = 50$  meV, sin campo eléctrico externo. (a) para ángulos de incidencia:  $\theta_0 = 0^\circ$  (línea sólida negra),  $\theta_0 = 5^\circ$  (línea roja punteada),  $\theta_0 = 10^\circ$  (línea discontinua azul) y  $\theta_0 = 30^\circ$  (línea de puntos y trazos verde). (b) para ángulos de incidencia:  $\theta_0 = 0^\circ$  (línea discontinua negra),  $\theta_0 = 2^\circ$  (línea roja sólida),  $\theta_0 = 4^\circ$  (línea azul punteada). . . . . 27

2.1. Distribución de varias barreras de potencial electrostático. . . . . 40

3.1. Comparación de la transmitancia como función de la energía para la matriz de transferencia (línea negra sólida) y la matriz híbrida (línea roja punteada) para una superred basada en doble capa de grafeno. El ancho de barreras y pozos es de  $40a$ , el ángulo de incidencia es de  $2.5^\circ$ , el alto de las barreras es 50 meV. Las figuras (a), (b) and (c) corresponden al número de barreras 3, 6 and 9, respectivamente. El zoom insertado en (a) y (b) muestra el perfil Fano y su energía de localización en el rango de energías. . . . . 58

3.2. Módulo del determinante en función de la energía para una superred basada en doble capa de grafeno, los parámetros son los mismos que en la Figura 3.1. . . . . 60

3.3. Módulo del determinante en función de la energía para una superred basada en doble capa de grafeno. El ancho de las barreras y pozos es de  $200a$ , el ángulo de incidencia de los electrones es de  $80^\circ$ , el alto de las barreras es de 100 meV y el número de barreras es 3. . . . . 61

3.4. Diagrama de contorno  $(E, \theta)$  para una superred basada en doble capa de grafeno. La primer columna corresponde a la resultados de la matriz de transferencia, y la segunda a la matriz híbrida. La primera ((a) y (b)), segunda ((c) y (d)), y tercera ((e) y (f)) filas corresponden a 3, 6 y 9 barreras. Los parámetros son los mismos que en la Figura 3.1. . . . . 62

3.5. Diagrama de contorno  $(E, \theta)$  para una superred basada en doble capa de grafeno. La primer columna corresponde a la resultados de la matriz de transferencia, y la segunda a la matriz híbrida. El número de barreras es  $m = 3$  y el alto de las barreras es  $V_0 = 50$  meV. Los anchos de pozos y barreras son:  $120a$  ((a) y (b)), y  $200a$  ((c) y (d)). . . . . 63

- 3.6. Evolución de las resonancias Fano a medida que el número de barreras aumenta. Las minibandas naturales surgen en una estructura periódica, pero en superredes basadas en doble capa de grafeno las minibandas podrían acoplarse con las resonancias Fano, dando lugar a perfiles o formas muy peculiares en la transmitancia. En (a) presentamos la transmitancia para un sistema de una (línea negra sólida y roja punteada) y dos barreras (línea azul sólida y magenta punteada), en este caso la transmitancia no presenta inestabilidades numéricas y fue calculada con ambos métodos, el método de la matriz de transferencia y el método de la matriz híbrida. En (c) presentamos la transmitancia para el caso de cinco barreras ( $m = 5$ ) donde la línea negra sólida y línea la roja punteada corresponden a CTM y HB, respectivamente. Los incisos (b) y (d) son los zooms de (a) y (c). Los parámetros del sistema son:  $V_0 = 25$  meV,  $dB = dW = 100a$  and  $\theta = 2.5^\circ$ . . . . . 64
- 3.7. Transmitancia versus energía para una superred basada en doble capa de grafeno con un número de barreras igual a: (a)  $m = 10$  and (c)  $m = 20$ . Los parámetros son los mismos que en la Figura 3.6. Surgen características especiales en la primer minibanda debido al acoplamiento entre las resonancias Fano con estados de la minibanda. El problema  $\Omega d$  abarca prácticamente la segunda minibanda para  $m = 10$ , mientras que para  $m = 20$  cubre la segunda minibanda y el gap que existe entre la primera y la segunda minibandas. . . . . 65
- 3.8. Transmitancia versus energía para una superred basada en doble capa de grafeno con un número de barreras igual a: (a)  $m = 30$  and (c)  $m = 50$ . Para  $m = 30$  el problema  $\Omega d$  afecta la transmitancia a altas energías y más del 50% de la primer minibanda en el caso de  $m = 50$ . Nótese que la matriz híbrida resuelve el problema  $\Omega d$  y obtiene excelentes resultados de la transmitancia independientemente de la energía, ángulo de incidencia y tamaño del sistema. . . . . 65

- 3.9. (a) Sección transversal del posible dispositivo para sistemas de una barrera en doble capa de grafeno. (b) Perfil de bandas de una barrera simple. (c) Desde una perspectiva de huecos un sistema de una barrera en doble capa de grafeno representa realmente un pozo cuántico. Además, el pozo cuántico puede contener estados discretos y de propagación como consecuencia de la cantidad de canales dentro de él. (d) Representación esquemática de la salida del acoplamiento de un estado propagante y uno discreto. En el caso del grafeno bicapa, la forma de la línea de transmisión dependerá de la energía, el ángulo de incidencia y el ancho y la altura de la barrera. 67
- 3.10. Transmitancia como función de la energía para sistemas de una barrera basados en doble capa de grafeno. (a) Resonancias Fano para varios ángulos de incidencia:  $1^\circ$  (línea negra sólida),  $3^\circ$  (línea roja a trazos),  $5^\circ$  (línea azul punteada) y  $15^\circ$  (línea verde a trazos y puntos). El ancho y la altura de la barrera permanecen fijos a 10 nm y 50 meV, respectivamente. (b) Evolución de las resonancias de Fano para diferentes anchos de barrera  $dB$ : 3 nm (línea negra sólida), 6 nm (línea roja a trazos), 10 nm (línea azul punteada) y 20 nm (línea verde a trazos y puntos). El ángulo de incidencia y la altura de barrera considerados son  $3^\circ$  y 50 mV, respectivamente. (c) Lo mismo que en (b) pero aquí  $V_0 = 100$  meV. . . . . 68
- 3.11. Conductancia como función de la energía de Fermi para sistemas de una barrera basados en doble capa de grafeno. (a) Conductancia para varios anchos de la barrera  $dB$ : 3 nm (línea negra sólida), 6 nm (línea roja a trazos), 10 nm (línea azul punteada) y 20 nm (línea verde a trazos y puntos). La altura de la barrera en todos los casos es de 50 meV. (b) Lo mismo que en (a) pero aquí  $V_0 = 100$  meV. Las rayas verticales sombreadas resaltan la ubicación de las resonancias Fano. . . . . 70
- 3.12. Conductancia como función de la energía de Fermi para BGSBs en el intervalo angular  $(-\pi/12, \pi/12)$  en el cual las resonancias Fano son preponderantes. Los altos de barrera considerados son (a) 50 meV and (b) 100 meV. El ancho de barrera es de 10 nm en ambos casos. . . . . 71

- 3.13. Transmitancia como función de la energía BGDBs. (a) Transmitancia para varios ángulos de incidencia:  $1^\circ$  (línea negra sólida),  $3^\circ$  (línea roja a trazos),  $5^\circ$  (línea azul punteada) y  $15^\circ$  (línea verde a trazos y puntos). El ancho de las barreras y el pozos y la altura de la barrera permanecen fijos a  $dB = dW = 10$  nm y  $V_0 = 50$  meV, respectivamente. (b) Evolución de la transmitancia para diferentes anchos de barreras y pozo  $dB = dW$ : 3 nm (línea negra sólida), 6 nm (línea roja a trazos), 9 nm (línea azul punteada) y 10 nm (línea verde a trazos y puntos). El ángulo de incidencia y la altura de barrera considerados son  $3^\circ$  y 50 mV, respectivamente. (c) Lo mismo que en (b) pero los anchos considerados son 3 nm (línea negra sólida), 6 nm (línea roja a trazos), 7 nm (línea azul punteada) y 9 nm (línea verde a trazos y puntos). Además  $V_0 = 100$  meV. . . . . 73
- 3.14. Evolución de las resonancias Fano híbridas para diferentes ángulos de incidencia: (a)  $3^\circ$ , (b)  $6^\circ$ , (c)  $9^\circ$  y (d)  $15^\circ$ . El ancho y la altura de las barreras son 10 nm y 50 meV, respectivamente. Como en el caso de las resonancias de Fano, la forma de línea híbrida es: bien definida en ángulos pequeños; se deforma y eventualmente se pierde a medida que aumenta el ángulo. . . . . 74
- 3.15. Conductancia como función de la energía de Fermi para BGDBs. (a) Conductancia para varios anchos de barreras y pozo  $dB = dW$ . Los anchos y las alturas corresponden a los utilizados en la figura 3.13b. (c) Similar a (a) pero los parámetros usados son los que corresponden a la figura 3.13c. (b,d) Representan los zooms para (a,c). Estas figuras tienen la intención de magnificar la región en la que las resonancias híbridas son preponderantes y aún más importante, cómo estas resonancias definen el perfil de las curvas de conductancia. Las rayas verticales sombreadas resaltan la ubicación de las resonancias Fano y las resonancias Fano híbridas. . . . . 75
- 3.16. Conductancia como función de la energía de Fermi para BGDBs en el intervalo angular  $(-\pi/12, \pi/12)$  en el cual las resonancias Fano son preponderantes. Los altos de barrera considerados son (a) 50 meV (10 nm) and (b) 100 meV (7 nm). . . . . 76

3.17. Representación esquemática de los posibles escenarios entre resonancias Fano y los estados de la minibanda. (a) La resonancia Fano (línea azul punteada) y la minibanda (región cian sombreada) se encuentran en diferentes regiones de energía, de modo que no hay acoplamiento entre ellas. (b) La resonancia Fano y la minibanda se encuentran en la misma región de energía y su acoplamiento puede tener lugar. (c) El acoplamiento de una resonancia Fano y los estados de minibanda dan lugar a nuevas características en el espectro de transmisión. . . . . 77

3.18. Transmitancia de BGS para diferentes anchos de barreras y pozos  $dB = dW$ : (a) 3 nm, (c) 5 nm y (e) 7 nm. En todos estos casos, la altura de las barreras, el ángulo de incidencia y el período de la superred se establecieron en 50 meV,  $3^\circ$  y 9, respectivamente. Para tener una mejor vista de la resonancia Fano y su acoplamiento con la minibanda, se muestran los zooms de los espectros de transmisión considerados. Específicamente, (b,d,f) representan los zooms de (a,c,e), respectivamente. . . . . 78

3.19. Conductancia de BGS para diferentes anchos de barreras y pozos  $dB = dW$ : (a) 3 nm, (c) 5 nm y (e) 7 nm. Para tener una mejor perspectiva de las huellas en las curvas conductancia de la contribución de las resonancias de Fano y su acoplamiento con los estados de minibanda, el rango de energía se ha reducido a la región de energía en la que el acoplamiento es preponderante. Los otros parámetros importantes de la superred son los mismos que en la Figura 3.18. Las rayas verticales sombreadas resaltan la región de energía en la que se produce el acoplamiento. . . . . 79

3.20. Conductancia de BGS para el intervalo angular en el cual el acoplamiento entre las resonancias de Fano y la minibanda es dominante. En este caso, el intervalo angular se ha reducido con respecto a los casos de barreras simples y dobles. En particular, el rango angular considerado es  $(-\pi/18, \pi/18)$ . (a) y (c) Corresponden a los anchos de las figuras 3.19c y 3.19e, respectivamente. Los otros parámetros estructurales de la superred son los mismos que en las figuras anteriores, Figuras. 3.18 y 3.19. (b,d) Representan los zooms de (a,c), respectivamente. . . . . 80

- 3.21. Comparación de espectros de transmisión de los Hamiltonianos a dos y cuatro bandas para BGSBs. Los gráficos muestran la Transmitancia como función de la energía para varios anchos de barrera. El ángulo de incidencia y el alto de barrera son  $3^\circ$  y  $V_0 = 50\text{meV}$ , respectivamente. Los anchos de barrera son  $dB$ : (a) 3 nm, (b) 7nm y (c) 10 nm. . . . . 81
- 3.22. Comparación de espectros de transmisión de los Hamiltonianos a dos y cuatro bandas para BGDBs. Los gráficos muestran la Transmitancia como función de la energía para varios anchos de barrera. El ángulo de incidencia y el alto de barrera son  $3^\circ$  y  $V_0 = 50\text{meV}$ , respectivamente. Los anchos de barrera son  $dB$ : (a) 3 nm, (b) 7nm, (c) 9 nm y (d) 10 nm. . . . . 82
- 3.23. Evolución de las resonancias Fano para BGSBs. Los gráficos muestran la Transmitancia como función de la energía para varios altos de barrera. El ángulo de incidencia y el ancho de barrera son  $3^\circ$  y  $dB = 7\text{nm}$ , respectivamente. Los altos de barrera son  $V_0$ : (a) 400 meV, (b) 500 meV, (c) 600 meV y (d) 700 meV. . . . . 83
- 3.24. Evolución de las resonancias Fano para BGDBs. Los gráficos muestran la Transmitancia como función de la energía para varios altos de barrera. El ángulo de incidencia y el ancho de barrera son  $3^\circ$  y  $dB = 7\text{nm}$ , respectivamente. Los altos de barrera son  $V_0$ : (a) 200 meV, (b) 400 meV, (c) 600 meV y (d) 800 meV. . . . . 84
- 3.25. Evolución de las resonancias Fano para varios bandgaps en BGSBs. Como se puede observar, a medida que aumenta el bandgap, la resonancia Fano se corre al rojo. Además, el perfil Fano prácticamente se pierde después de un bandgap de 30 meV. El bandgap se define como  $E_g = V_1 - V_2$ . En este caso,  $V_2$  varía, mientras que  $V_1$  permanece fijo a 100 meV. . . . . 85

3.26. Evolución de las resonancias Fano para varios bandgaps en BGDBs. Como podemos observar, a medida que aumenta el bandgap, la resonancia Fano se corre al rojo. Además, el perfil Fano prácticamente se pierde después de un bandgap de 30 meV. Para este caso,  $V_2$  varía, mientras que  $V_1$  permanece fijo a 100 meV. En comparación con BGSBs los espectros sufrieron un desplazamiento a bajas energías. . . . . 87

3.27. Evolución de las resonancias Fano para varios bandgaps en BGSBs. Como se puede observar, a medida que aumenta el bandgap, la resonancia Fano se corre al rojo. Además, el perfil Fano prácticamente se pierde después de un bandgap de 10 meV. En este caso,  $V_2$  varía, mientras que  $V_1$  permanece fijo a 50 meV. . . . . 87

B.1. Soluciones gráficas de las ecuaciones (B.5) y (B.6) para los estados confinados en BGSBs. La línea negra punteada representa  $\tan(q_x dB')$ , mientras que las curvas roja sólida y azul a trazos corresponden a las ramas  $\sqrt{\beta^2 - (q_x dB')^2}/q_x dB'$  y  $-q_x dB'/\sqrt{\beta^2 - (q_x dB')^2}$ . En todos los casos el alto de la barrera es  $V_0 = 50$  meV. En (a) las curvas roja sólida y azul a trazos corresponden a  $dB = 3$  nm ( $\beta = 0.103$ ) y  $dB = 6$  nm ( $\beta = 0.413$ ) respectivamente, mientras que en (b) las mismas curvas corresponden a  $dB = 10$  nm ( $\beta = 1.148$ ) and  $dB = 20$  nm ( $\beta = 4.593$ ). Las líneas verticales negras punteadas son las asíntotas de  $\tan(q_x dB')$ . Los estados confinados están determinados por las intersecciones de las curvas negras punteadas con las curvas roja sólida y azul a trazos. . . . . 96

B.2. Los parámetros son los mismos que en la Figura B.1 pero aquí  $V_0 = 100$  meV. . . . 97





# Índice de tablas

3.1. Comparación de las energías de los estados confinados obtenidos por el método presentado en el Apéndice B y las energías de las resonancias Fano encontradas en los espectros de transmisión de BGSBs. Se ha definido la razón entre el ancho y alto de barrera $\eta = dB/V_0$ como un parámetro que caracteriza a la barrera. Las energías están dadas en meV y los anchos de barreras en nm. . . . .	69
B.1. Energías de los estados confinados para BGSBs calculados con los valores de $q_x dB'$ obtenidos por medio del método gráfico, Figs. B.1 and B.2. Las energías están dadas en meV, mientras que las longitudes en nm. $\beta$ y $q_x dB'$ son parámetros adimensionales.	98



# Introducción

## 1.1. Materiales Bidimensionales: El Grafeno

Cuando se habla de las propiedades generales de un material la dimensionalidad juega un papel importante como parámetro definitorio. Un mismo elemento puede presentar propiedades tan diferentes dependiendo si presenta una estructura cristalina en un arreglo 0D, 1D, 2D o 3D [1]. El elemento químico más conocido por sus diferentes alótropos es el Carbono (Figura 1.1), en un arreglo 3D se encuentran el diamante y el grafito, en el arreglo 1D los nanotubos y en el arreglo 0D los fullerenos [2–4]. Un hecho importante hablando de dimensionalidad es que el arreglo 2D siempre fue uno de los paradigmas de la física del estado sólido, pues se creía que los materiales bidimensionales eran imposibles de existir debido a las fluctuaciones térmicas en redes cristalinas de baja dimensión o mejor dicho eran termodinámicamente inestables [5–7].

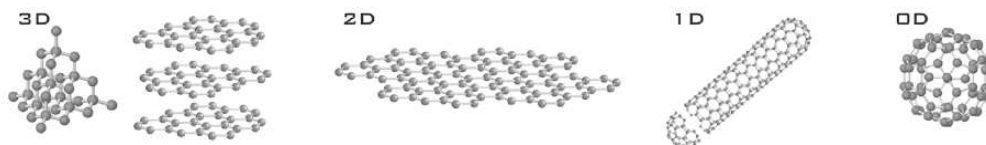


Figura 1.1: Los diferentes alótropos del Carbono.

El grafeno [4], un material puramente bidimensional, compuesto por átomos de carbono que forman una red hexagonal plana de un átomo de espesor (0.15 nm), fue descubierto por los científicos Andre Geim y Kostia Novoselov en el año 2004 en la Universidad de Manchester mediante la técnica conocida como exfoliación micromecánica [8]. El descubrimiento de este material era un mito, es por ello que a estos científicos se les otorgo el Premio Nobel 2010 por tal hazaña.

La Figura 1.2 muestra la red hexagonal del grafeno, que es una red de Bravais triangular con vectores de red

$$\vec{\mathbf{a}}_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}), \quad \vec{\mathbf{a}}_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}), \quad (1.1)$$

con  $a = 1.42\text{\AA}$  la distancia entre átomos vecinos. La celda unitaria cuenta con dos átomos que pertenecen cada uno a una subred triangular A o B, mismas que están interpenetradas.

P. R. Wallace fue el primero en estudiar teóricamente el material bidimensional conocido como grafeno [9], su trabajo consistía en explicar algunas de las propiedades del grafito [10, 11], entonces tomando en cuenta que el espaciamiento entre los planos es grande (3.37 nm) en comparación con el espaciamiento hexagonal de una lámina (1.42 Å), una primera aproximación era despreciar la interacción entre planos y tomar en cuenta que la conducción solo da lugar en cada una de las láminas, esto llevo a Wallace a calcular la estructura de bandas del grafeno, y se sorprendió pues encontró la conexión entre la física del estado sólido y la electrodinámica cuántica, la estructura de bandas del grafeno a bajas energías es lineal (Figura 1.3), el hamiltoniano que describe a los electrones en el grafeno esta dado por

$$\hat{H} = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} = \hbar v_F (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}), \quad (1.2)$$

donde  $\mathbf{k}$  es el momento,  $\boldsymbol{\sigma}$  las matrices de Pauli y  $v_F$  la velocidad de Fermi. Esto implica que los

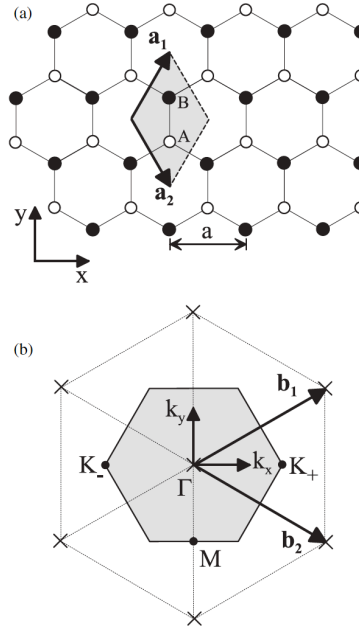


Figura 1.2: (a) Estructura cristalina del grafeno con átomos  $A(B)$  mostrados con círculos de color blancos (negros), que a su vez muestran las subredes triangulares interpenetradas. El rombo sombreado muestra la celda unitaria donde  $a_1$  y  $a_2$  son los vectores de red. (b) Red recíproca del grafeno,  $b_1$  y  $b_2$  son los vectores recíprocos. La zona hexagonal sombreada es la primer zona de Brillouin con  $\Gamma$  indicando el centro de la zona,  $K_+$  y  $K_-$  son los puntos de Dirac.

electrones en el grafeno se comporten como partículas sin masa con una velocidad trescientas veces menor a la de la luz, similares a los neutrinos, partículas relativistas que viajan a la velocidad de la luz. Por lo tanto el grafeno es un sistema de estado sólido en el cual los electrones se rigen por las leyes de la electrodinámica cuántica, no presentan masa y la velocidad de Fermi sustituye a la de la luz.

En vista de lo anterior, la ecuación de Dirac es la ecuación que se usa para describir a los electrones (quasipartículas) mejor conocidos como Fermiones de Dirac sin masa [12–14],

$$-i\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \quad (1.3)$$

en donde  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)^T$  es el vector de las matrices de Pauli, las funciones de onda pueden ser biespinores o espinores de cuatro componentes y a su vez dan las contribuciones relativas de las

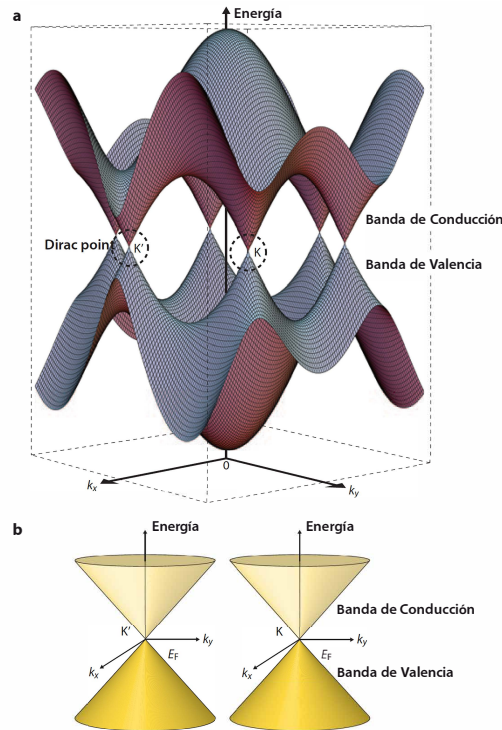


Figura 1.3: (a) Bandas de energía cerca del nivel de Fermi en el grafeno. Las bandas de conducción y valencia se cruzan en los puntos  $K'$  y  $K$ , conocidos como puntos de Dirac. (b) Bandas de energía cónicas cerca de los puntos de Dirac  $K'$  y  $K$ .

subredes A y B en el transporte. ¿Qué significa esto? que los electrones y huecos se mueven en grafeno a través de las subredes triangulares, una propiedad similar a la conjugación de la carga en la electrodinámica cuántica, eso significa que el biespínor en el grafeno indica en que subred se mueven las quasipartículas y no al espín real de los electrones. A esta propiedad se le conoce como pseudoespín y se denota por  $\sigma$ . Otra característica importante es la relación entre el movimiento de las quasipartículas y el pseudoespín, conocida como quiralidad [15], positiva para electrones y negativa para huecos [11]. La quiralidad es la propiedad causante de que el grafeno presente una fase de Berry de  $\pi$ , provocando un efecto conocido como Tunelaje Klein [14, 16–19], un efecto exótico que disminuye las posibilidades de utilizar al grafeno en dispositivos nanoelectrónicos, asimismo la fase de Berry también está relacionada con efectos como el efecto Hall cuántico anómalo [20, 21] y el efecto Aharonov-Bohm [22, 23].

## 1.2. Doble capa de grafeno: Un material cuasi-bidimensional

Así como la dimensionalidad es capaz de cambiar drásticamente las propiedades de un material, también existe prueba de que algunos cambios nanométricos en una estructura pueden cambiar de manera radical sus propiedades. Esa prueba es el material comúnmente conocido como doble capa de grafeno [21, 24, 25], que de igual manera que la monocapa de grafeno puede ser obtenido mediante la técnica de exfoliación micromecánica [25]. La doble capa de grafeno es el apilamiento de dos láminas de grafeno con una separación de  $3.4 \text{ \AA}$  entre ambas capas (Figura 1.4), una distancia pequeña a nuestra percepción pero demasiado grande en el mundo nanoscópico. Es por ello que las fuerzas de van der Waals son interacciones más débiles en comparación con la interacción entre átomos de carbono [25].

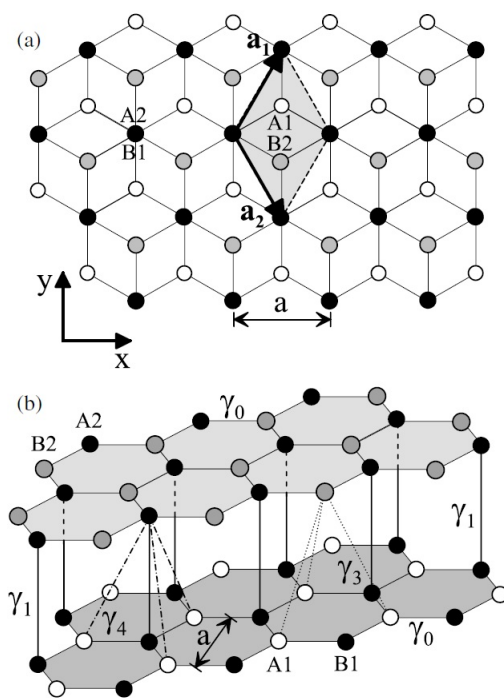


Figura 1.4: (a) Doble capa de grafeno desde una vista superior, Los átomos A1 y B1 están representados por círculos de color blanco y negro, respectivamente, en la primer lámina de grafeno, mientras que en la lámina rotada los átomos A2 y B2 son los círculos negros y grises, respectivamente. El rombo sombreado representa la celda unitaria. (b) Doble capa de grafeno en su forma cristalina, existen ciertas interacciones entre los átomos de ambas láminas representados por las letras  $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_3$  y  $\gamma_4$ .



Existen 3 diferentes tipos de apilamientos entre capas, el arreglo AA aquel en que las láminas están una encima de la otra, el arreglo Bernal o arreglo AB es aquel en el que las láminas están rotadas entre si un ángulo de  $60^\circ$ , y el arreglo más general donde las láminas están rotadas un ángulo diferentes de  $60^\circ$ . El arreglo más estable es el arreglo AB o Bernal [26]. Cada una de las láminas de grafeno cuenta con dos subredes, A y B, por lo tanto los átomos de carbono de las subredes A coinciden exactamente una encima de la otra, con un factor de interacción  $\gamma_1 = t_\perp$  con un valor aproximadamente de 0.39 eV, en el caso de las subredes B el proceso de interacción es más complicado (existen interacciones oblicuas más débiles que  $\gamma_1$  y  $\gamma_0$ , como  $\gamma_3 = 0.38$  eV y  $\gamma_4 = 0.14$  eV). A bajas energías el factor de interacción entre átomos de carbono  $\gamma_0 = t \approx 3.9$  eV es dominante y mayor que  $\gamma_1$  [24]. Entonces en la doble capa cada celda unitaria tiene cuatro átomos, en la figura se encuentran etiquetados por A1,B1 para la lámina inferior y A2,B2 para la superior, los vectores de red están dados por

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}), \quad (1.4)$$

donde  $a = 2.46$  Å es la constante de red, es decir, la distancia entre celdas unitarias adyacentes.

Las bandas de energía se muestran en la Figura 1.5, a lo largo del eje  $k_x$  en el espacio recíproco,  $K_+$  y  $K_-$  son las intersecciones y  $\Gamma$  es el centro de la Zona de Brillouin [24, 27, 30]. La doble capa de grafeno presenta cuatro bandas de energía, un par de bandas de conducción y un par de bandas de valencia, prácticamente en toda la zona de Brillouin cada par está separado por una energía del orden de  $\gamma_1 \approx 0.39$  eV. En la misma figura se hace un zoom cerca de los puntos  $K$ , ahí se tocan una banda de conducción y una de valencia, mientras que las otras dos bandas están separadas por una energía del orden de  $\gamma_1$ . En la doble capa de grafeno pristino la región a bajas energías se vuelve relevante porque ahí la energía de Fermi se encuentra donde las bandas de conducción y valencia se tocan.

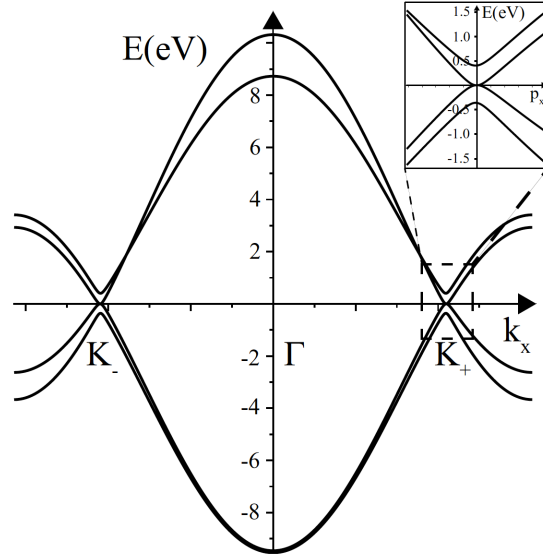


Figura 1.5: Estructura de bandas de la doble capa de grafeno, en el zoom se muestran las bandas a bajas energías, éstas bandas se tocan en los puntos  $K_+$  y  $K_-$  y son parabólicas.

Cerca de los puntos  $K$ , los electrones pueden describirse por el Hamiltoniano

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \epsilon_{A1} & v\pi^\dagger & -v_4\pi^\dagger & v_3\pi \\ v\pi & \epsilon_{B1} & \gamma_1 & -v_4\pi^\dagger \\ -v_4\pi & \gamma_1 & \epsilon_{A2} & v\pi^\dagger \\ v_3\pi^\dagger & -v_4\pi & v\pi & \epsilon_{B2} \end{pmatrix}, \quad (1.5)$$

en donde  $\pi = \xi p_x + ip_y$ ,  $\pi^\dagger = \xi p_x - ip_y$ ,  $\xi = \pm 1$ . Las energías  $\epsilon_{A1}$ ,  $\epsilon_{B1}$ ,  $\epsilon_{A2}$ ,  $\epsilon_{B2}$  corresponden a las energías en los sitios A1, B1, A2 y B2 de la bicapa de grafeno y las velocidades efectivas son:

$$v = \frac{\sqrt{3}a\gamma_0}{2\hbar} \quad (1.6)$$

$$v_3 = \frac{\sqrt{3}a\gamma_3}{2\hbar} \quad (1.7)$$

$$v_4 = \frac{\sqrt{3}a\gamma_4}{2\hbar}. \quad (1.8)$$

Si se desprecian los términos débiles como  $v_4\pi$  y  $v_4\pi^\dagger$  las energías llegan a ser  $E = \pm\epsilon_\alpha(p)$ , con  $\alpha = 1, 2$ , en donde

$$\epsilon_\alpha^2 = \frac{\gamma_a^2}{2} + \frac{U^2}{4} + (v^2 + \frac{v_3^2}{2})p^2 + (-1)^\alpha\sqrt{\Gamma}, \quad (1.9)$$

$$\Gamma = \frac{1}{4}(\gamma_1 - v_3^2 p^2)^2 + v^2 p^2 [\gamma_1^2 + U^2 + v_3^2 p^2] + 2\xi\gamma_1 v_3 v^2 p^3 \cos 3\varphi, \quad (1.10)$$

donde  $\varphi$  es el ángulo polar del momento  $p = (p_x = p \cos \varphi, p_y = p \sin \varphi)$ . Para el caso  $\alpha = 2$ , la energía  $\epsilon_2$  describe las bandas que están separadas por  $\gamma_1$ , mientras que las bandas a bajas energías son  $E = \pm\epsilon_1$ . Un caso importante es el siguiente, si se considera un rango de energías entre  $U, (v_3/v)^2\gamma_1 < \epsilon_1 < \gamma_1$  es posible despreciar  $U$  y el parámetro de interacción  $\gamma_3$  y entonces se pueden aproximar las bandas de energías como

$$\epsilon_1 \approx \frac{1}{2}[\sqrt{1 + 4v^2 p^2 / \gamma_1^2} - 1], \quad (1.11)$$

lo interesante es que lo anterior interpola la energía entre una relación de dispersión lineal  $\epsilon_1 \approx vp$  a una relación de dispersión parabólica  $\epsilon_1 \approx p^2/2m$ , tomando en cuenta que  $p \gg 1$ , donde  $m = \gamma_1/2v^2$  si  $p \ll 1$ , el cruce ocurre a un momento  $p \approx \gamma_1/2v$ . Un Hamiltoniano efectivo para describir a los electrones a bajar energías se puede obtener eliminando las componentes del Hamiltoniano (1.5) relacionadas con la interacción  $\gamma_1$ , este Hamiltoniano se puede escribir como

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m} \begin{pmatrix} 0 & (\pi^\dagger)^2 \\ (\pi)^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.12)$$

como podemos observar este Hamiltoniano se asemeja al de la monocapa de grafeno pero con términos cuadráticos del momento en la diagonal, las soluciones son partículas quirales masivas con

una relación de dispersión parabólica  $E = \pm p^2/2m$ , donde el término de masa es  $m = \gamma_1/2v$  [24,30].

La función de onda correspondiente está dada por

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \mp e^{2i\xi\varphi} \end{pmatrix} e^{\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}}, \quad (1.13)$$

esta función de onda describe las amplitudes electrónicas en los sitios  $A1$  y  $B2$  además de introducir el concepto de pseudoespín (un grado de libertad más para el sistema) relacionado con tales amplitudes. El pseudoespín es muy similar al concepto de espín del electrón la única diferencia es que el pseudoespín se relaciona con la localización de la carga, por ejemplo, si la densidad de carga se encuentra en los sitios  $A1$  entonces el pseudoespín  $|\uparrow\rangle = (1, 0)$  puede ser visto como el pseudoespín up o en caso contrario el pseudoespín down para electrones situados en el sitio  $B2$ . Sin embargo la densidad de carga en la doble capa de grafeno pristino se encuentra generalmente distribuida equitativamente sobre las dos láminas de grafeno, eso significa que el pseudoespín es una combinación lineal de pseudoespín up and pseudoespín down como  $|\uparrow\rangle \mp e^{2i\xi\varphi} |\downarrow\rangle$ .

Para una dirección dada en el momento  $\mathbf{p} = (p \cos \varphi, p \sin \varphi)$  de una cuasi-partícula, los Hamiltonianos (1.2) y (1.12) son variaciones de un Hamiltoniano general  $H_J$  con forma [21,27]

$$\begin{pmatrix} 0 & (\pi^\dagger)^J \\ (\pi)^J & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.14)$$

y que puede ser escrito como

$$\hat{H}_J = \epsilon(p) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}(\varphi), \quad (1.15)$$

el vector  $\mathbf{n} = (-\cos J\varphi, \sin J\varphi)$  es un vector unitario que da la dirección de cuantización y  $\boldsymbol{\sigma}$  es un vector que tiene como elementos las matrices de Pauli [27]. El símbolo  $J$  tiene como valores  $J = 1$  para el caso de la monocapa de grafeno y  $J = 2$  para el caso de la doble capa de grafeno. Los

eigenvalores de  $\hat{H}_J$  corresponden a pseudoespines paralelos a  $\mathbf{n}$  (electrones) o bien antiparalelos (huecos). Luego una evolución adiabática acompaña a la rotación del momento  $\mathbf{p}$  por un ángulo  $\varphi$ , que también corresponde a la rotación del eje de cuantización  $\mathbf{n}$  en el ángulo  $J\varphi$ . Esto significa que si una cuasipartícula sigue un contorno cerrado en el espacio de momentos, un cambio de fase  $\Phi = J\pi$  conocido como Fase de Berry se obtiene mediante la función de onda de la cuasipartícula. Dicho de otra forma, la fase de Berry surge de la rotación del pseudoespín cuando la cuasipartícula se mueve entre las diferentes subredes de la monocapa o bien entre los sitios  $A1$  y  $B2$  de la doble capa de grafeno [21]. En el caso de este último material la fase de Berry es  $2\pi$ , mientras que para la monocapa de grafeno la fase de Berry es igual a  $\pi$  [17, 21, 27].

### 1.3. Efecto Hall Cuántico Entero

El confinamiento de electrones en sistemas bidimensionales puede dar origen a fenómenos de transporte mecánico-cuánticos. Un efecto muy interesante y que se presenta en varias versiones es el efecto Hall cuántico. Este efecto es exclusivo de los sistemas bidimensionales, ocurre a bajas temperaturas y su investigación ha llevado a la creación de una nueva norma estándar en metrología, el quantum de resistencia,  $h/e^2$ . Generalmente, el efecto Hall cuántico ocurre cuando un gas de electrones se somete a un campo magnético perpendicular, y este gas de electrones se mueve siguiendo una órbita en forma de ciclotrón y sus energías serán cuantizadas por ciertos niveles conocidos como niveles de Landau o cuantización de Landau [21].

La doble capa de grafeno es un material cuasi-bidimensional y se ha demostrado mediante experimentos de transporte que presenta un efecto Hall cuántico entero muy similar al efecto Hall cuántico convencional propio de los semiconductores convencionales [21]. Su origen puede ser explicado mediante el concepto de fase de Berry, que involucra un acoplamiento entre el pseudoespín y el movimiento orbital de los portadores de carga en la doble capa, lo que da lugar a una fase geométrica de  $2\pi$  acumulada a lo largo de trayectorias de ciclotrón [21, 24].

En la Figura 1.6 se muestran los resultados para la conductividad Hall en (a) semiconductores

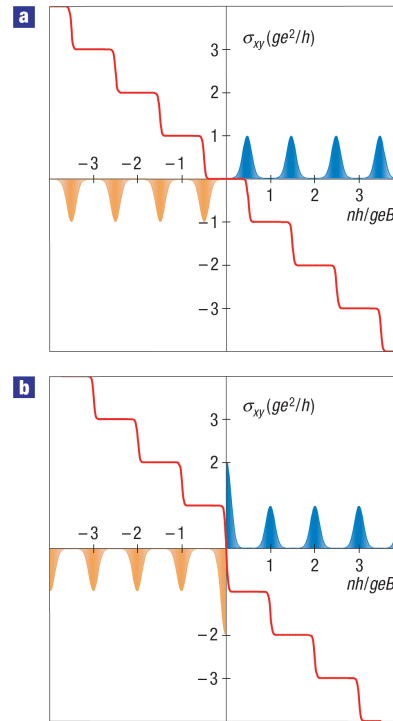


Figura 1.6: efecto Hall cuántico entero para: (a) semiconductores convencionales y (b) doble capa de grafeno. Las mesetas en la conductividad Hall ocurren en valores de  $(ge^2/h)N$ , donde  $N$  es un entero,  $g$  es la degeneración del sistema. Los niveles de Landau como función de la concentración de carga  $n$  se muestran en azul (electrones) y naranja (huecos).

convencionales y en (b) doble capa de grafeno. En el caso de la doble capa de grafeno las mesetas en la conductividad Hall siguen el mismo patrón tipo escalera y desplazadas por números enteros, la única diferencia es que la meseta que se presenta en cero para semiconductores convencionales no aparece en la doble capa de grafeno, en su lugar aparece un salto doble en conductividad Hall. Las mesetas Hall en la doble capa de grafeno siguen la siguiente secuencia en términos del quantum de resistencia,

$$\sigma_{xy} = \pm \frac{4e^2}{h} N \quad \text{para} \quad N \geq 1, \quad (1.16)$$

no existe algún indicio de las mesetas a  $N = 0$  en  $\sigma_{xy} = 0$ , la cual es característica de los sistemas bidimensionales comunes, pero sí existe un salto que pasa por el punto de neutralidad, del doble del

tamaño. Esto significa que la transición entre el hueco más bajo y la primer meseta Hall requiera el doble de portadores necesarios para la transición entre las otras mesetas. Esto implica que el nivel de Landau más bajo tenga doble degeneración.

La aparición de este efecto Hall cuántico entero se da con la aparición de las cuasipartículas quirales masivas en la doble capa de grafeno, debido al acople de las dos capas de grafeno, tales cuasipartículas tienen un espectro de energía parabólico,  $E(p) = p^2/2m$  con una masa efectiva  $m$ , sin embargo también presentan un pseudoespín asociado pero una fase de Berry de  $2\pi$  a lo largo de trayectorias de ciclotrón, esta fase es indistinguible de cero en el límite cuasi-clásico ( $N \gg 1$ ) pero revela la doble degeneración en los niveles de Landau a cero energía, pues la cuantización de Landau para la doble capa de grafeno es

$$E_N = \pm \hbar w_c \sqrt{N(N-1)}, \quad (1.17)$$

donde  $w_c$  es la frecuencia de ciclotrón, por lo tanto tenemos una doble degeneración pues  $E_0 = E_1$  [27]. La existencia de esta doble degeneración en los niveles de Landau explica la marcada falta de la meseta en cero en la conductividad Hall y del doble paso de altura en esta región.

## 1.4. Estados Invisibles

El fuerte acoplamiento entre la orientación del pseudoespín y el movimiento de los portadores de carga en la doble capa de grafeno tiene fuertes consecuencias en las propiedades de transporte en sistemas multibarreras. Los portadores de carga en la doble capa de grafeno son partículas quirales masivas y su dinámica en sistemas multibarreras se rige por su naturaleza quiral. Cuando se hacen incidir electrones normalmente hacia una barrera de potencial, el desajuste de quiralidades lleva a un desacople de estados en regiones de polaridad opuesta, Figura 1.7, los electrones de una quiralidad están confinados dentro de la barrera, aún cuando haya un continuo de estados disponibles fuera de la barrera. Por otro lado, los electrones en la región externa a la barrera se

dispersan y también logran atravesar la barrera como si no hubiera estados localizados disponibles en su camino. Lo anterior significa que la barrera actúa como una capa que hace invisibles a los estados confinados para la transmisión y la reflexión. Pero a incidencia oblicua el desacoplamiento del pseudoespín es imperfecto y por lo tanto se producen resonancias de transmisión asociadas a estados confinados. Sin embargo estas resonancias son muy estrechas a ángulos de incidencia pequeños haciendo que los estados externos sean ciegos a los estados confinados en casi todas las energías. Esto produce un efecto de invisibilidad de alta fidelidad para todos los ángulos de incidencia pequeños cercanos a la incidencia normal [28, 29].

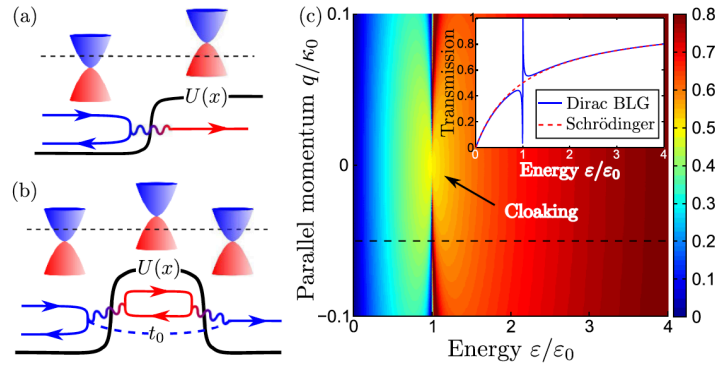


Figura 1.7: Invisibilidad de las resonancias de transmisión en uniones balísticas  $p-n-p$  debido al desacople de estados. (a) Para un potencial tipo función paso, el acoplamiento del pseudoespín es cero a incidencia normal. Esto lleva a (b) la formación de estados confinados dentro de la barrera causando resonancias estrechas en la transmitancia. El efecto de invisibilidad se muestra en (c) para un potencial de barrera tipo delta que tiene un estado confinado que produce una resonancia de transmisión en  $\epsilon = \epsilon_0$ .

Este problema se puede analizar utilizando la base  $\sigma_x$ ,  $\sigma_x \psi_{\pm} = \pm \psi_{\pm}$ . En esta base la ecuación de Schrödinger se desacopla para incidencia normal ( $q_y = 0$ ) en dos ecuaciones de Schrödinger escalares:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \pm (V(x) - E) \right) \psi_{\pm} = 0. \quad (1.18)$$

Las soluciones para  $\psi_+$  describen estados continuos que viven fuera la barrera mientras que las soluciones  $\psi_-$  describen estados acotados confinados en el potencial invertido  $-V(x)$ . Como estos



estados confinados están desacoplados completamente de los estados continuos a  $q_y = 0$  no aparecen en la transmitancia a incidencia normal. Por el contrario a incidencia oblicua  $q_y \neq 0$  se obtienen dos ecuaciones acopladas

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - q_y^2 \pm (V(x) - E) \right) \psi_{\pm} = 2q_y \frac{d\psi_{\mp}}{dx}. \quad (1.19)$$

Debido a la mezcla  $\psi_+/\psi_-$ , los estados confinados se acoplan con el continuo y por lo tanto surgen resonancias en la transmitancias.

El efecto de invisibilidad es perfecto a incidencia normal, y casi perfecto a una incidencia casi normal. Los estados confinados se manifiestan a sí mismos como resonancias en la conductancia balística con formas de línea no lorentzianas características con singularidades de raíz cuadrada debido a la invisibilidad, Figura 1.8. Este efecto de invisibilidad en doble capa de grafeno fue recientemente descubierto y comprobado mediante experimentos de transporte usando campos magnéticos débiles [28, 29].

## 1.5. Resonancias Fano

Las resonancias son uno de los fenómenos de mayor investigación teórica y experimental, se estudian con mucha profundidad en física, química, ingeniería y materias afines [1, 31, 32]. Se presenta en sistemas tan sencillos como un columpio, una guitarra, un oscilador, entre otros [31]. La razón de su aparición es simple, todos los sistemas anteriores vibran u oscilan de alguna forma, pero si se quisiera que su amplitud de oscilación aumentara sólo se tendrá que suministrarle energía adicional acorde a ritmo natural de vaivén y con ello se dice que está en resonancia con su estado de movimiento. En la mayoría de los casos se ha demostrado que la distribución de Breit-Wigner puede ser considerada como una huella digital del fenómeno de resonancia [33], sin embargo existen otros tipos de resonancias que no se describen con la distribución de Breit-Wigner, como las resonancias Fano [31, 32, 34–36], las antiresonancias [37], las resonancias debido a la transparencia inducida

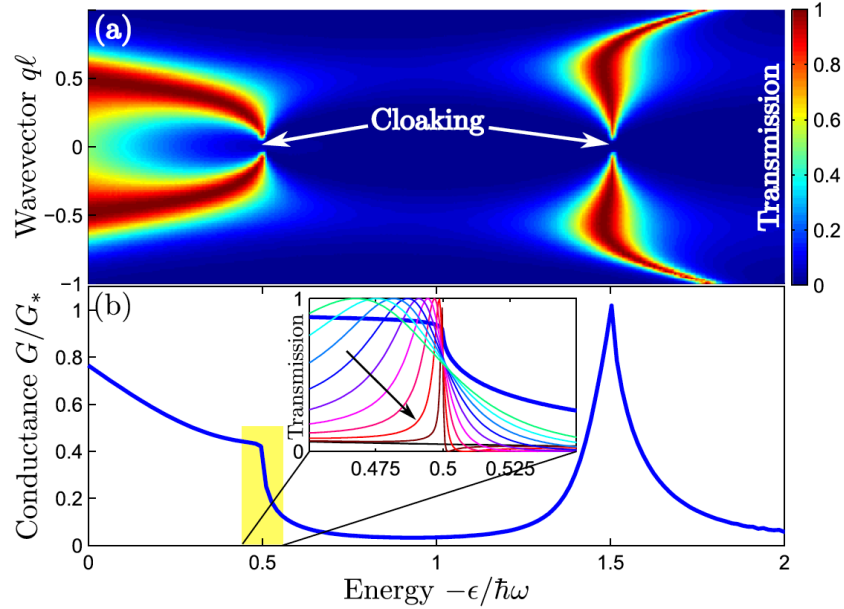


Figura 1.8: (a) Transmitancia y (b) conductancia para una barrera parabólica con  $V(x) = -\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ . Se muestran las resonancias correspondientes a los dos primeros estados acotados del oscilador armónico. Se puede ver que a incidencia normal  $q_y = 0$  los estados confinados son invisibles por la barrera debido al desajuste de quiralidad con los estados continuos fuera de la barrera. Las resonancias en la conductancia muestran la singularidad de raíz cuadrada.

electromagnéticamente o EIT por sus siglas en inglés [38], y las resonancias híbridas [39]. Todos estos tipos de resonancias se han tratado de describir en términos de interferencia de ondas. En el proceso de dispersión de ondas, la corta distancia de propagación hace interesante el proceso de fase coherente, y la propagación a lo largo de diferentes caminos tiene como consecuencia el fenómeno de interferencia, donde la interferencia constructiva corresponde a un aumento resonante y la interferencia destructiva a una supresión de la transmitancia [32]. Uno de los fenómenos más interesantes es la interferencia entre un estado discreto o bien una onda localizada y estados propagantes, este proceso da origen a la resonancia Fano [31, 32, 34–36]. Ésta es un fenómeno de interferencia cuántica, una línea asimétrica es su característica más peculiar y se presenta en muchos experimentos de distintos campos de la física, como la óptica y el estado sólido [32].

Su origen se remonta a los inicios de la mecánica cuántica, un par de décadas después de que Niels Bohr sentara las bases de la mecánica cuántica utilizando las líneas espectrales del átomo de

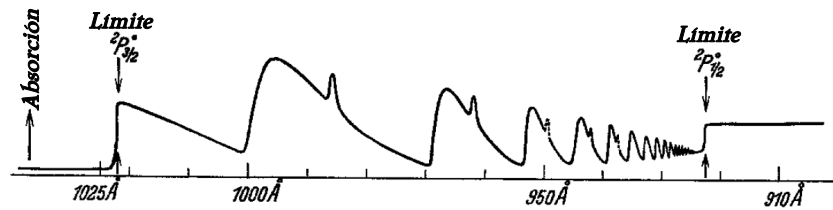


Figura 1.9: Espectro de absorción para el gas noble Xenón encontrado por Beutler en 1935.

hidrógeno, Beutler observó líneas asimétricas en el espectro de absorción del gas noble Xenón, la Figura 1.9 muestra los resultados obtenidos por Beutler [34]. Ese mismo año, en 1935, el científico Ugo Fano sugirió una explicación teórica no detallada de este efecto y propuso una fórmula que predice la forma de las líneas espectrales [35], pero no fue sino hasta 30 años después que formuló a detalle su teoría, en un trabajo que llegó a ser uno de los más importantes de la física del siglo XX y que hasta la fecha cuenta con mas de 6000 citas [36]. En su trabajo Ugo Fano interpretó las líneas asimétricas como una interacción entre un estado discreto y uno continuo de un átomo que comparten un mismo nivel energético, Figura 1.10. Su trabajo prácticamente se basó en la teoría de configuraciones [36], particularmente en la fotoionización de un átomo por diferentes caminos, utilizando la autoionización como el principal mecanismo para acoplar estados acotados de un canal con los estados continuos de otro, luego implementando el principio de superposición de la mecánica cuántica cada vez que dos estados se acoplan por diferentes caminos, hay posibilidades de que ocurra interferencia.

Estado Discreto    Mezclado    Estado Continuo    Resonancia Fano

$$\frac{q^2 - 1}{\epsilon^2 + 1} + \frac{2q\epsilon}{\epsilon^2 + 1} + 1 = \frac{(\epsilon + q)^2}{\epsilon^2 + 1}$$

Figura 1.10: Representación esquemática de una resonancia Fano como el acople entre un estado discreto y uno continuo.

Para abordar el problema del perfil asimétrico Fano utilizó la teoría de perturbaciones. Como prueba de su ingenio y para abordar el problema él considero un acoplamiento entre estados acotados discretos, además degenerado en energía con un continuo de estados, a cero, y lo llamó estado prediagonalizado. Esto le sirvió como una herramienta matemática muy conveniente para resolver el problema, escribió la fórmula para la forma del perfil de resonancia en el caso de la sección transversal de dispersión como

$$\sigma = \frac{(\epsilon + q)^2}{\epsilon^2 + 1}, \quad (1.20)$$

aquí  $q$  es un parámetro fenomenológico que da la forma de la resonancia y  $\epsilon$  es la energía reducida definida por  $2(E - E_F)/\Gamma$ .  $E_F$  es la energía donde ocurre la resonancia y  $\Gamma$  el ancho del estado autoionizado.

Tomando en cuenta el análisis de máximos y mínimos en la ecuación 1.20, se encuentra que

$$\sigma_{\min} = 0, \quad \text{en } \epsilon = -q, \quad (1.21)$$

$$\sigma_{\max} = 1 + q^2, \quad \text{en } \epsilon = 1/q. \quad (1.22)$$

Además para observar que formas toma la resonancia según valores de  $q$ , veáse la figura 1.11, se toman los casos límites, si  $|q| \rightarrow \infty$  domina la transición al estado discreto y por lo tanto la forma de la resonancia es dominada por el perfil Breit-Wigner donde la frecuencia de resonancia coincide con el máximo de la curva [33]. Si  $q$  es del orden de la unidad, las transiciones entre estados son de la misma magnitud dando como resultado el perfil asimétrico y la frecuencia de resonancias se localizará en el centro de la resonancia (exactamente a la mitad entre el máximo y el mínimo). Otro de los valores interesantes es cuando  $q = 0$  en este caso ocurre una bajada simétrica, un fenómeno conocido como antiresonancia, y su frecuencia de resonancia coincide con el mínimo de la curva.

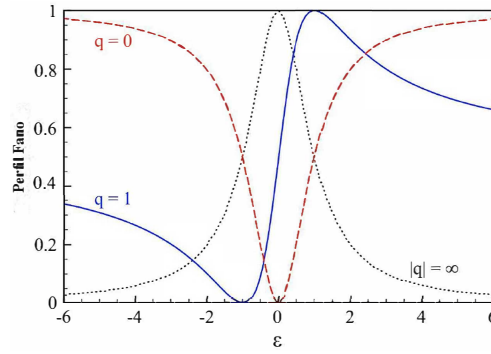


Figura 1.11: Perfiles Fano normalizados al factor  $1/(1+q^2)$  para  $q=0$ ,  $q=1$  y  $q \rightarrow \infty$ .

Existen ciertas situaciones físicas o mejor dicho sistemas físicos en donde las resonancias Fano son típicamente observadas. El primer caso es el ejemplo clásico, dos osciladores acoplados [31,32], donde uno de ellos está impulsado por una fuerza periódica externa, el diagrama se muestra en la Figura 1.12. De manera general, existen dos resonancias alrededor de las eigenfrecuencias  $\omega_1 = 1.0$  y  $\omega_2 = 1.2$  de los osciladores. En el caso del oscilador que no está sometido a la fuerza periódica ambas resonancias en su amplitud pueden describirse por una función Lorentziana y se conocen como resonancias Breit-Wigner [33]. Sin embargo, una de las resonancias del oscilador forzado aumenta su amplitud cerca de su eigenfrecuencia  $\omega_-$ , mientras tanto en correspondencia con la eigenfrecuencia  $\omega_+$  presenta un resonancia inusual caracterizada por un perfil asimétrico, exhibiendo así una supresión total de la amplitud a la eigenfrecuencia del segundo oscilador  $\omega_2 = 1.2$ . Esto se debe a la interferencia destructiva de las oscilaciones de la fuerza periódica externa y el segundo oscilador. Todos los detalles se muestran en [31].

De hecho, se sabe que existe una diferencia de fase entre los osciladores igual a  $\pi$ , lo que significa que por debajo de la resonancia  $\omega_2 = 1.2$  el oscilador está en fase con la fuerza periódica externa y se desfasa por encima de la resonancia. Por lo tanto, en un sistema de dos osciladores acoplados a la resonancia del segundo oscilador, sobre el primero actúan dos fuerzas externas desfasadas y que se cancelan entre sí dando origen a resonancias Fano. Este ejemplo clásico muestra una de las características de las resonancias Fano, la interferencia destructiva resonante.

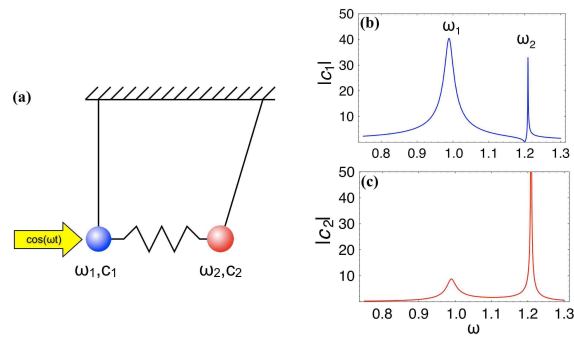


Figura 1.12: (a) Diagrama de dos osciladores acoplados, uno de ellos sometido a una fuerza periódica externa. (b) Dependencia resonante de la amplitud del oscilador armónico forzado, (c) Dependencia resonante de la amplitud del segundo oscilador armónico.

Otro ejemplo donde aparecen las resonancias Fano, tiene que ver con luz y la estructura de la materia, el experimento trata sobre la sección transversal de absorción de un único punto cuántico [40]. Este experimento es muy interesante porque a este punto cuántico, al que en ocasiones le llaman átomo artificial, se le hace incidir un rayo láser, luego al variar la potencia del láser cambia continuamente la transición de estados, y con ello se puede tunear el parámetro de asimetría  $q$ , estos resultados se muestran en la Figura 1.13. Si la potencia es alta, la tasa de transición a estados discretos se satura mientras que la tasa de transición a estados continuos no, entonces poco a poco la tasa de transición de estados continuos coincidirá con la tasa de transición a estados discretos y como resultado, un perfil simétrico tipo Lorentziano a baja potencia se transformará en una resonancia Fano a alta potencia.

Existen aún más ejemplos donde aparecen las resonancias Fano, la mayoría relacionados con la óptica, pues según la definición de Ugo Fano las resonancias Fano surgen de la interferencia de estados discretos con continuos, lo que significa que generalmente es necesario tener una fuente de luz para poder observarlas. Respecto al tema de superredes también existen investigaciones en superredes semiconductoras donde mediante la aplicación de voltaje podemos manipular el parámetro de acoplamiento Fano  $\Gamma$  entre estados discretos y estados continuos, aún así es necesario una fuente de luz, para más detalle véase [41]. Uno de los trabajos hace hincapié a resonancias Fano debidas a interacciones entre excitaciones elementales [42]. A diferencia de las resonancias Fano

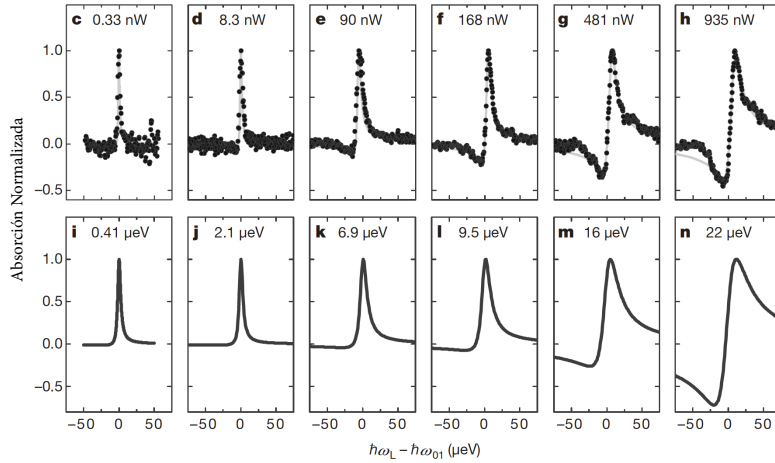


Figura 1.13: Variación del parámetro de asimetría  $q$ . La fila superior muestra los resultados obtenidos en laboratorio y la fila inferior los resultados teóricos para el espectro de absorción de un punto cuántico con incidencia de luz láser a diferentes potencias. Se puede observar que con el incremento de la potencia del láser el perfil pasa de ser simétrico a ser asimétrico.

que se dan por la interferencia entre estados discretos y continuos, o bien, entre transiciones de un solo electrón en átomos y puntos cuánticos, en tal trabajo se obtienen resonancias Fano mediante la interferencia controlada entre excitones continuos (par electrón-hueco creado por luz) y fonones discretos en sistemas basados en doble capa de grafeno, el experimento consiste en aplicar un campo eléctrico perpendicular a la doble capa de grafeno mismo que le rompe la simetría de inversión y que provoca cambios drásticos a sus propiedades electrónicas y vibracionales, véase la Figura 1.14.

Con más detalle, un campo eléctrico normal induce un bandgap y un dopaje de cargas a la doble capa de grafeno. Estos dos parámetros pueden ser controlados independientemente en un dispositivo doble puerta de doble capa de grafeno. Controlando los campos de desplazamiento originados por debajo y por encima de la doble capa de grafeno ( $D_b$  y  $D_t$ , respectivamente) entonces  $\Delta D = D_b - D_t$  determina el dopaje de cargas y  $\bar{D} = (D_b + D_t)/2$  determina el bandgap. Luego en el caso de las vibraciones de fonones en doble capa de grafeno prístino, nos centramos en el fonón simétrico del modo G. Este lleva un momento bipolar cero y, por lo tanto, es infrarrojo inactivo en la doble capa de grafeno prístino. Un campo eléctrico normal, sin embargo, rompe la simetría entre las

capas superior e inferior, dopando con cargas el sitio A de la capa inferior y en el sitio B de la capa superior, volviéndose iones de carga opuesta en un cristal polar y sus vibraciones se activan por infrarrojos. El bandgap inducido por el campo eléctrico normal y la actividad infrarroja de fonones conducen a cambios dramáticos en los espectros de absorción infrarroja en la doble capa de grafeno. Dando lugar a la aparición de resonancias Fano, debido a una nueva excitación elemental de naturaleza híbrida de fonón-excitón. En otras palabras, la interferencia es entre las vibraciones fonónicas que juegan el papel de estados discretos y las excitaciones del par electrón-hueco que juegan el papel de estados continuos.

Los electrones en la doble capa de grafeno gracias a la relación de dispersión parabólica a bajas energías y a las funciones de onda encontradas al utilizar el Hamiltoniano correspondiente, que envuelven ondas tanto propagantes como evanescentes-divergentes, se comportan en la naturaleza como si presentaran ambos estados, presentan este carácter especial y sólo ellos lo presentan. Por lo tanto, la existencia de resonancias Fano es una característica única y especial en sistemas basados en la doble capa de grafeno [43–47].

## 1.6. Resonancias Fano y la doble capa de grafeno

La propagación de electrones a través de sistemas de barreras de potencial es esencial en la física del estado sólido para analizar estructuras que pueden darle un giro significativo a la ciencia y tecnología de hoy en día, estructuras que van desde los transistores hasta las superredes. Asimismo sus aplicaciones van desde el decaimiento  $\alpha$  hasta la producción de los láseres cuánticos de cascada. Un efecto muy estudiado pero con poca ventajas de ser utilizado en aplicaciones tecnológicas es el Efecto Klein [14, 16, 17], el tunelaje cuántico juega un papel importante a la hora de explicar tal fenómeno. El tunelaje Klein es el efecto de transmisión perfecta a incidencia normal en la propagación de electrones a través de una región que en la física clásica esta prohibida. Ha sido demostrado de manera teórica como experimentalmente en el caso del grafeno utilizando barreras electrostáticas [14, 16, 17]. La figura 1.15 muestra un diagrama sencillo para entender el efecto Klein.



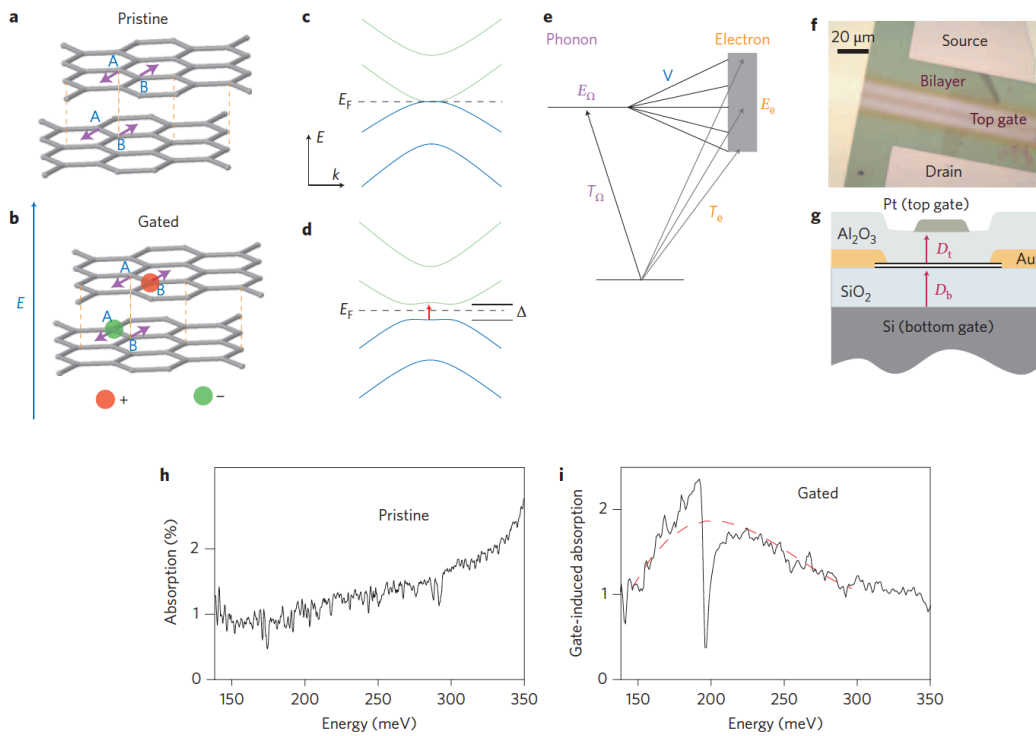


Figura 1.14: Diagrama de un dispositivo de doble puerta basado en doble capa de grafeno. (a) Fonón óptico simétrico en una doble capa de grafeno prístino con un arreglo AB y con momento dipolar cero. (b) Dopaje de cargas inducidas por el campo eléctrico normal y que lleva a una actividad infrarroja en el fonón óptico. (c) Estructura de bandas de la Doble capa de grafeno prístino sin bandgap. (d) Un campo eléctrico normal genera un bandgap en la estructura de bandas de la doble capa de grafeno. (e) Diagrama de la resonancia Fano que describe las transiciones infrarrojas interferentes a los estados electrónicos continuos de fonones discretos y continuos. (f) Imagen de microscopio óptico de un dispositivo típico de doble puerta basado en doble capa de grafeno. (g) El ilustración del dispositivo anterior visto lateralmente. (h) Espectro de absorción infrarroja de la doble capa de grafeno prístino, la absorción es relativamente plana y no hay resonancias. (i) Espectro de absorción infrarroja de la doble capa de grafeno con un campo eléctrico incidiendo normalmente, aquí el dopaje es cero y el bandgap es de 190 meV. La resonancia del fonón en 195 meV aparece como una caída en lugar de un pico de absorción debido a la interferencia Fano.

En grafeno este efecto ocurre porque a bajas energías los electrones se transforman en Fermiones de Dirac sin masa y con una velocidad trescientas veces menor a la velocidad de la luz, y que obedecen a una relación de dispersión lineal, por lo tanto la física relativista es la que se aplica en la propagación de electrones en grafeno. Debido a lo anterior las soluciones en sistemas de barreras y pozos basados en grafeno corresponden a ondas propagantes en ambas regiones, por lo tanto no

existen estados cuasi-acotados dentro del pozo. Sin embargo en el caso de la doble capa de grafeno, el acoplamiento de las dos láminas de grafeno que la conforman transforma a los electrones en un nuevo tipo de cuasi-partícula sin un análogo en la electrodinámica cuántica. Los electrones en doble capa de grafeno son partículas quirales masivas con una masa 25 veces menor que la masa del electrón en reposo y que obedecen a una relación de dispersión parabólica, además las soluciones en regiones de barreras y pozos basados en este material están representadas por una superposición lineal de estados evanescentes-divergentes y estados propagantes, esta superposición de estados abre la posibilidad de la aparición de resonancias Fano en la transmitancia en problemas de propagación de electrones en sistemas basados en doble capa de grafeno y por ende su estudio se vuelve importante porque tiene aplicaciones en sensores, láseres, switches, dispositivos no lineales, invisibilidad, EIT, entre otras [38, 43–45, 48, 49].

S. Mukhopadhyay, R. Biswas y C. Sinha, demostraron lo que se mencionó en el párrafo anterior de manera teórica [43–45], utilizaron dos sistemas de una y dos barreras y analizaron dos tipos de casos, el primero sin la aplicación de un campo eléctrico externo y el segundo con campo eléctrico externo, veáse la Figura 1.16. Sin mucho detalle, se analizaran algunos de sus resultados. La Figura 1.17 muestra la transmitancia como función de la energía para el sistema de una barrera de potencial, el ancho es de  $b = 10$  nm y el alto  $V_0 = 50$  meV, el análisis se hace a diferentes ángulos de incidencia para el caso en que no existe campo eléctrico externo (Figura 1.17a) y a diferentes campos eléctricos externos con un ángulo de incidencia de  $\theta_0 = 10^\circ$  (Figura 1.17b).

En el primer caso, a incidencia normal no existen resonancias Fano, y tampoco transmisión de acuerdo a lo encontrado por Katsnelson, Novoselov y Geim y en contraste con la perfecta transmisión a incidencia normal en el grafeno [14]. Cuando el ángulo aumenta las resonancias Fano hacen su aparición debido a la interferencia constructiva y destructiva de estados evanescentes-divergentes y estados propagantes cerca de  $E \approx V_0/2$ . El perfil Fano se conserva hasta ángulos menores a  $25^\circ$ . Esto significa que las resonancias Fano son sensibles al ángulo de incidencia y que sólo se dan a ángulos de incidencia pequeños. Por otro lado, el efecto que surge de la aplicación de un campo eléctrico externo es desplazar a las resonancias Fano hacia energías cercanas a cero

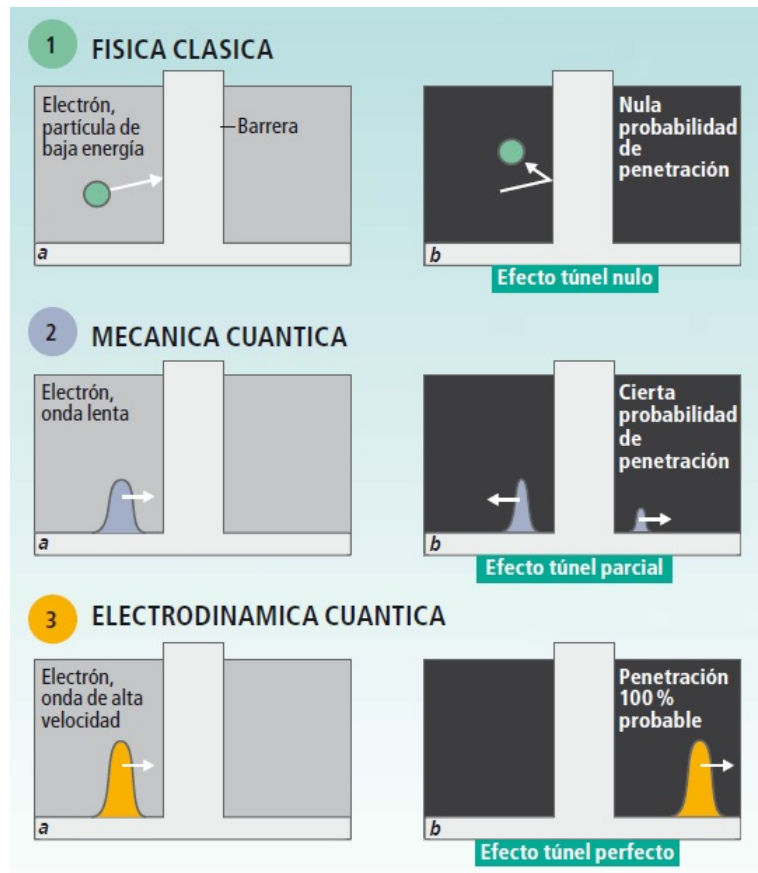


Figura 1.15: Efecto Túnel. (a) En física clásica si se hace incidir un electrón a sobre una barrera, si la energía del electrón es menor al de la barrera no puede cruzar. (b) En la mecánica cuántica la dualidad onda-partícula abre la posibilidad de que el electrón cruce la barrera. (c) En la electrodinámica cuántica un electrón a velocidades cercanas a las de la luz siempre cruzará la barrera.

junto con una supresión de la transmitancia.

Para el sistema de dos barreras sin campo eléctrico externo, Figura 1.18, encontraron de igual manera que las resonancias Fano son sensibles al ángulo de incidencia, pero el perfil asimétrico que las caracteriza se ve fuertemente afectado debido al tamaño del sistema, comparado con el sistema de una barrera, el tamaño del sistema se incremento por un facto de 3. El efecto de esto es la aparición de nuevas resonancias, tal como se muestran en la Figura 1.18a, algunas no identificadas por los autores pero que si aparecen en la literatura como resonancias híbridas o EIT's. El hecho de que haya aumentado el tamaño del sistema causó que el rango de ángulos de incidencia posibles

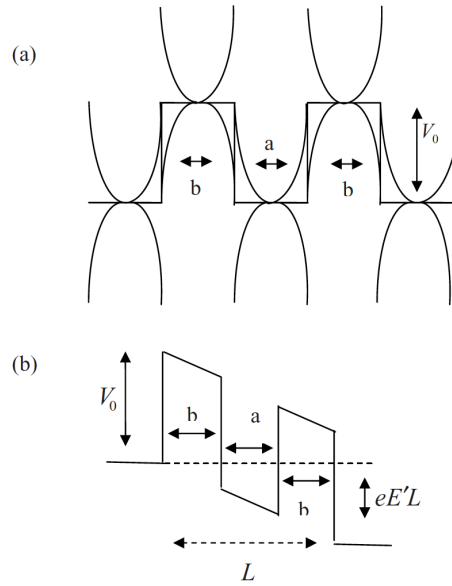


Figura 1.16: Diagrama Esquemático para (a) el perfil de bandas en sistemas de dos barreras en doble capa de grafeno sin campo eléctrico externo y (b) bajo la aplicación de un campo eléctrico externo.

para la aparición de resonancias Fano se vea reducido, Figura 1.18b. Por lo tanto, las resonancias Fano son altamente sensibles a ángulo de incidencia y al tamaño del sistema.

## 1.7. Motivación

Las resonancias Fano en la doble capa de grafeno son un fenómeno exótico único, y se debe gracias al carácter que presentan los electrones en este material a bajas energías. Lo que vuelve aún más interesante este fenómeno es que es un efecto que aún no ha sido observado en experimentos de transporte como otros efectos, por ejemplo, el efecto Klein [17] y el efecto Hall cuántico semientero en el caso del grafeno [50], o bien el efecto Hall cuántico entero [21, 24, 27] y los estados invisibles en el caso de la doble capa de grafeno [28, 29, 51]. Parte de la motivación para el presente proyecto de tesis se debe a la casi ausencia de trabajos acerca de las resonancias Fano en la doble capa de grafeno, y considerando que su aplicación en dispositivos electrónicos pueda ser viable, es necesario estudiar las propiedades de transmisión y transporte en sistemas basados en doble capa

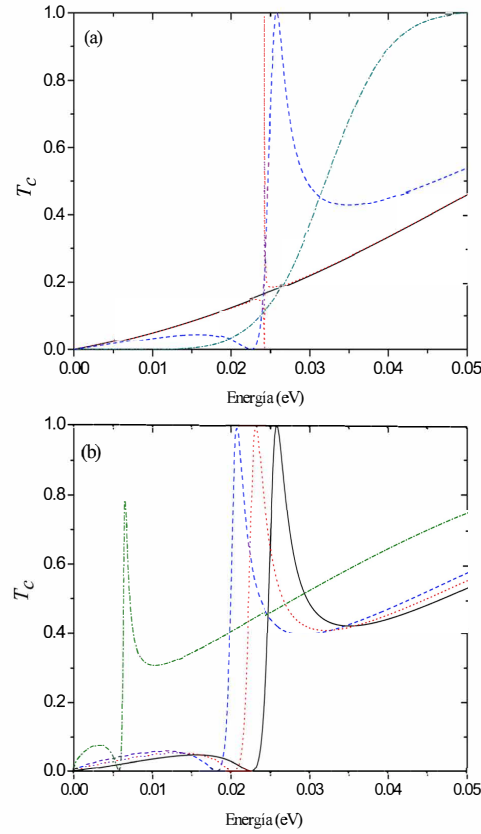


Figura 1.17: Transmitancia como función de la energía para una barrera en doble capa de grafeno con un ancho de  $b = 10$  nm y alto  $V_0 = 50$  meV. (a) Sin la aplicación de un campo eléctrico externo, para ángulos de incidencia:  $\theta_0 = 0^\circ$  (línea sólida negra),  $\theta_0 = 1^\circ$  (línea roja punteada),  $\theta_0 = 10^\circ$  (línea discontinua azul) y  $\theta_0 = 30^\circ$  (línea de puntos y trazos verde). (b) Bajo un campo eléctrico externo y para un ángulo de incidencia  $\theta_0 = 10^\circ$ . para  $E' = 0$  V/m (línea sólida negra),  $E' = 5 \times 10^5$  V/m (línea punteada roja),  $E' = 1 \times 10^6$  V/m (línea discontinua azul) y  $E' = 5 \times 10^6$  V/m (línea de puntos y trazos verde).

de grafeno, particularmente en el tema de superredes por la gran importancia y aplicación que actualmente pueden tener estos sistemas. Además en comparación con el grafeno, la doble capa tiene la ventaja de que se le puede abrir gap mediante la aplicación de un campo eléctrico externo.

Con lo anterior se espera que esta tesis pueda servir de referencia para futuras investigaciones, tanto teóricas como experimentales, y que se pueda llegar a demostrar la existencia de las resonancias Fano en la propagación de electrones a través de sistemas multibarreras basados en doble

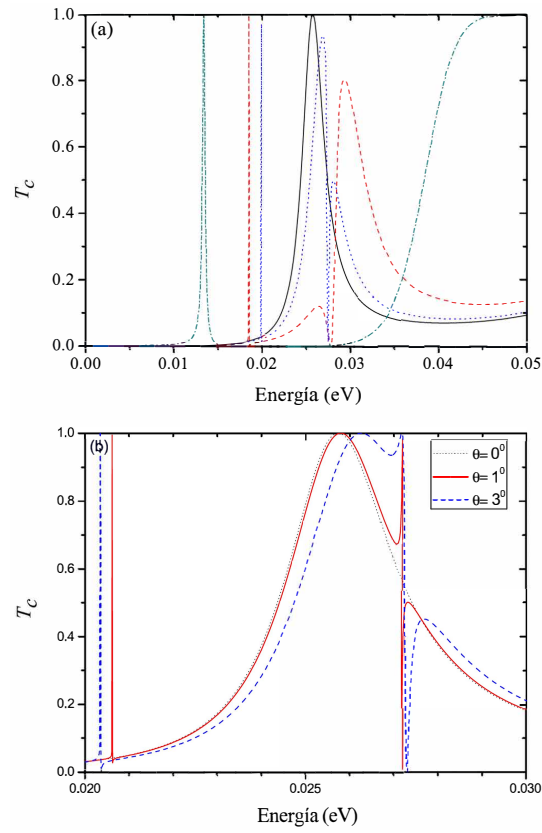


Figura 1.18: Transmitancia como función de la energía para dos barreras en doble capa de grafeno con un ancho de barreras de  $b = 10$  nm, ancho de pozo de  $a = 10$  nm y alto  $V_0 = 50$  meV, sin campo eléctrico externo. (a) para ángulos de incidencia:  $\theta_0 = 0^\circ$  (línea sólida negra),  $\theta_0 = 5^\circ$  (línea roja punteada),  $\theta_0 = 10^\circ$  (línea discontinua azul) y  $\theta_0 = 30^\circ$  (línea de puntos y trazos verde). (b) para ángulos de incidencia:  $\theta_0 = 0^\circ$  (línea discontinua negra),  $\theta_0 = 2^\circ$  (línea roja sólida),  $\theta_0 = 4^\circ$  (línea azul punteada).

capa de grafeno, especialmente en superredes.

## 1.8. Objetivo Principal

Estudiar las propiedades de transmisión y transporte en sistemas periódicos basados en doble capa de grafeno y analizar a detalle el origen de las resonancias Fano y de que manera afectan las propiedades de transporte, particularmente, en la conductancia, y como es que se manifiestan en tales curvas.

## 1.9. Metas

Para alcanzar el objetivo principal se plantearon varias metas con la finalidad de abordar el problema de manera completa, la lista de metas es la siguiente:

1. Resolver la inestabilidad numérica al que es susceptible el método de la matriz de transferencia, para ello, implementaremos el método de la matriz híbrida, un método numéricamente estable y que evade tales inestabilidades independientemente de los parámetros del sistema. Realizar la comparación entre ambos métodos y utilizar el que dé los resultados más fiables en las propiedades de transmisión en sistemas basados en doble capa de grafeno.
2. Determinar las propiedades de transmisión en sistemas de una, dos y una superred basados en doble capa de grafeno, particularmente, la transmitancia como función de la energía variando los diferentes parámetros del sistema: anchos de barreras y pozos, altos de barrera, ángulo de incidencia y el número de regiones de barreras y pozos. Asimismo identificar en todo momento donde aparecen las resonancias Fano y cuales son los parámetros para modularlas, todo esto utilizando el Hamiltoniano a dos bandas.
3. Calcular las propiedades de transporte, particularmente, la conductancia en el régimen lineal, y tomando en cuenta los resultados de la transmitancia encontrar las regiones en que las resonancias Fano afectan a tales curvas e identificar la huella para caracterizarla.
4. Utilizando el Hamiltoniano a cuatro bandas, calcular las propiedades de transmisión y transporte, guiándonos con los parámetros que modulan las resonancias Fano e identificar si la no parabolicidad y el band gap afectan a las resonancias Fano y si dejan alguna huella en la conductancia.

## Metodología

En este capítulo se procedió a desarrollar el método de la matriz de transferencia [52, 53] y la matriz híbrida y la relación entre ellos [54–58], además se muestran los detalles tanto para la aproximación a dos bandas como para la de cuatro bandas [24, 27, 30, 59]. La utilización de ambos métodos se debe a lo siguiente: La extensa investigación que se ha realizado en la propagación de electrones en medios multibarreras ha hecho que la utilización del método de la matriz de transferencia para el análisis de tales sistemas sea de lo más común. Este método facilita la transición de los coeficientes de las funciones de onda de los electrones de una interfaz a otra mediante las condiciones de frontera apropiadas. El método de la matriz de transferencia es aplicable en principio a la mayoría de los problemas de propagación de ondas, sin embargo recientemente se ha demostrado que su implementación directa sufre inestabilidades numéricas, el problema más común es el llamado **Problema  $\Omega d$**  [54, 56, 57]. Este problema se ha asignado a productos de alta frecuencia-espesor de capas, y ha sido muy persistente en el estudio de la propagación de ondas en medios multibarreras [54, 56, 57]. El nombre se acuñó en la investigación, en donde las expresiones que producen esta inestabilidad tienen la forma  $\Omega d$  donde  $\Omega$  representa una función de la frecuencia [56]. Por consiguiente, el método de la matriz híbrida resuelve el problema de la inestabilidad numérica presente en el método de la matriz de transferencia, la forma en que se definen las matrices en el método de la matriz híbrida permite evadir la dicotomía exponencial en productos de alta



frecuencia-espesor de capas involucrados en las matrices dinámicas y de propagación definidas en el método de la matriz de transferencia. Por último, al final del capítulo se muestra el formalismo de Landauer-Bütikker para el cálculo de las curvas de conductancia y se implementa este mismo formalismo para el cálculo de las curvas de conductancia con discriminación angular.

## 2.1. Matriz de transferencia para el Hamiltoniano a dos bandas

En primer lugar se toma como sistema general multibarreras al sistema conocido comúnmente como superred. En el caso de la doble capa de grafeno a bajas energías, especialmente en el caso en que sólo se considera la interacción entre átomos carbono-carbono ( $\gamma_0 = 3.09$  eV), los electrones o mejor dicho los portadores de carga tienen una relación de dispersión parabólica descrita por el siguiente hamiltoniano

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \begin{pmatrix} 0 & (q_x - iq_y)^2 \\ (q_x + iq_y)^2 & 0 \end{pmatrix} + V(x) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

donde  $q_x$  y  $q_y$  son los vectores de onda de los portadores a lo largo de las direcciones  $x$  y  $y$  respectivamente, el término de masa  $m$  es la masa efectiva con un valor de  $0.035 m_0$ , donde  $m_0$  es la masa del electrón en el vacío [43–45]. El alto de las barreras en la superred viene determinado por el siguiente perfil unidimensional a lo largo de la dirección  $x$ ,

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{para barreras} \\ 0 & \text{para pozos} \end{cases} \quad (2.2)$$

tomando en cuenta lo anterior y resolviendo la ecuación de eigenvalores,

$$H\psi = E\psi, \quad (2.3)$$

se puede obtener fácilmente la relación de dispersión parabólica dada por

$$E - V_0 = \pm \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{q}^2; \quad \mathbf{q} = (q_x, q_y), \quad (2.4)$$

y también las eigenfunciones,

$$\psi_{\pm}^q = \begin{pmatrix} 1 \\ v_{\pm}^q \end{pmatrix} e^{\pm i q_x x + i q_y y}, \quad (2.5)$$

que corresponde a estados propagantes y

$$\psi_{\pm}^{\beta} = \begin{pmatrix} 1 \\ v_{\pm}^{\beta} \end{pmatrix} e^{\pm \beta_x x + i q_y y}, \quad (2.6)$$

que corresponde a estados evanescentes-divergentes. Asimismo, los eigenvectores  $q_x$  y  $\beta_x$  se pueden obtener de la ecuación (2.4),

$$q_x = \sqrt{\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) (E - V_0) - q_y^2}; \quad (2.7)$$

$$\beta_x = \sqrt{\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) (E - V_0) + q_y^2}, \quad (2.8)$$

con  $q_y = \sin(\theta) \sqrt{2mE/\hbar^2}$ . Por último los coeficientes de las eigenfunciones  $v_{\pm}^q$  and  $v_{\pm}^{\beta}$  son

$$v_{\pm}^q = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{(\pm q_x + i q_y)^2}{E - V_0}, \quad (2.9)$$

y

$$v_{\pm}^{\beta} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{(\pm \beta_x + q_y)^2}{E - V_0}. \quad (2.10)$$

Cabe aclarar que en el desarrollo anterior se está considerando el hecho de que existen regiones con potenciales electrostáticos, o bien barreras de potencial, para el caso en el que no existan potenciales electrostáticos, es decir las regiones de pozo, se puede tomar lo anterior con  $V_0 = 0$ .

La solución más general para cualquiera de las regiones, ya sea pozo o barrera, se puede expresar como una combinación lineal de las cuatro eigenfunciones encontradas, entonces

$$\psi(x, y) = A_+ \psi_+^q + A_- \psi_-^q + B_+ \psi_+^\beta + B_- \psi_-^\beta, \quad (2.11)$$

en donde  $A_+$ ,  $A_-$ ,  $B_+$ ,  $B_-$  es un conjunto de coeficientes de expansión. Con las eigenfunciones en mano, se puede formular el método de la matriz de transferencia aplicando de manera correcta las condiciones de continuidad en cada una de las interfaces de la superred [46, 47, 57]. En este caso se tiene que considerar la continuidad de las eigenfunciones así como sus derivadas en cada interfaz a lo largo del eje  $x$ . Para asegurar la continuidad, es necesario tomar en cuenta la conservación de la probabilidad de densidad de corriente y la conservación del momento transversal ( $q_y$ ). De esta manera se puede obtener la matriz de transferencia ( $\mathbf{K}$ ) que relaciona los coeficientes de la solución general de las ondas salientes  $\psi(x_R, y)$  en la región semi-infinita derecha (R) como función de los coeficientes de la solución general de las ondas entrantes  $\psi(x_R, y)$  en la región semi-infinita izquierda (L), es decir

$$\begin{pmatrix} A_+(\text{L}) \\ A_-(\text{L}) \\ B_+(\text{L}) \\ B_-(\text{L}) \end{pmatrix} = \mathbf{K} \cdot \begin{pmatrix} A_+(\text{R}) e^{i\kappa_x x_R} \\ A_-(\text{R}) e^{-i\kappa_x x_R} \\ B_+(\text{R}) e^{\alpha_x x_R} \\ B_-(\text{R}) e^{-\alpha_x x_R} \end{pmatrix}; \quad (2.12)$$

aquí  $\kappa_x / \alpha_x$  es el vector de onda  $q_x / \beta_x$  evaluado para  $V_0 = 0$ .

La matriz  $\mathbf{K}$  es conocida como matriz de transferencia de coeficientes o bien simplemente matriz de transferencia, se define como

$$\mathbf{K} = D_L^{-1} \cdot \prod_{j=1}^N (D_j \cdot P_j \cdot D_j^{-1}) \cdot D_L, \quad (2.13)$$

donde  $N$  es el número de regiones localizadas entre las regiones semi-infinitas (L, R), es decir, es

el número total de barreras y pozos que forman la superred. Esta matriz esta dada en función de matrices que contienen toda la información necesaria para describir a los portadores en cada una de las regiones, las matrices son  $D$  y  $P$ , llevan por nombre matrices dinámicas y de propagación, respectivamente, y se expresan como

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ v_+^q & v_-^q & v_+^\beta & v_-^\beta \\ iq_x & -iq_x & \beta_x & -\beta_x \\ iq_x v_+^q & -iq_x v_-^q & \beta_x v_+^\beta & -\beta_x v_-^\beta \end{pmatrix}; \quad (2.14)$$

$$P = \begin{pmatrix} e^{-iq_x d} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{iq_x d} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\beta_x d} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{\beta_x d} \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

En la ecuación (2.13) el subíndice  $L / j$  indica en que región son evaluadas las matrices  $D$  y  $P$ . El parámetro  $d$  indica el ancho de la región.

Antes de calcular la transmitancia, se asumirá que la incidencia de los portadores de carga es de izquierda a derecha, por lo tanto se tomarán en cuenta las siguientes consideraciones:

- El coeficiente  $A_-(R) = 0$  porque no existe onda reflejada desde la región derecha semi-infinita.
- Los coeficientes  $B_+(R) = 0$  y  $B_-(L) = 0$  para evitar soluciones sin significado físico cuando  $x \rightarrow \pm\infty$ .

Colocando estas condiciones a la frontera en la expresión (2.12), es fácil calcular la transmitancia  $T$  mediante la ecuación

$$T = \left| \frac{A_+(R) e^{i\kappa_x x_R}}{A_+(L)} \right|^2 = \frac{|\mathbf{K}_{44}|^2}{|\mathbf{K}_{11}\mathbf{K}_{44} - \mathbf{K}_{14}\mathbf{K}_{41}|^2}. \quad (2.16)$$

Observe que la transmitancia puede ser calculada usando solo 4 de los 16 elementos matriciales de la matriz de transferencia ( $\mathbf{K}$ ).

## 2.2. Matriz de transferencia para el Hamiltoniano a cuatro bandas

Otra manera de abordar el problema de la propagación de electrones a través de sistemas basados en la doble capa de grafeno es utilizar la aproximación perpendicular entre las capas ( $\gamma_1 = 390$  meV) [24, 58], en este caso los portadores de carga estarán descritos por el siguiente hamiltoniano

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} V_1 & \pi & t_{\perp} & 0 \\ \pi^{\dagger} & V_1 & 0 & 0 \\ t_{\perp} & 0 & V_2 & \pi^{\dagger} \\ 0 & 0 & \pi & V_2 \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

donde

$$\pi = v_F(p_x + ip_y), \quad (2.18)$$

$$\pi^{\dagger} = v_F(p_x - ip_y), \quad (2.19)$$

y además

$$p_x = \hbar q_x = -i\hbar \frac{d}{dx}, \quad (2.20)$$

$$p_y = \hbar q_y = -i\hbar \frac{d}{dy}. \quad (2.21)$$

Los potenciales  $V_1$  y  $V_2$  son aplicados de alguna manera a las capas superior e inferior de la doble capa de grafeno, abriendo la posibilidad de abrir un gap [58].

Utilizando nuevamente la ecuación de eigenvalores es posible determinar la relación de dispersión lineal no parabólica. Solo para mostrar que difiere de la ecuación (2.4) la expresión para la relación de dispersión utilizando la aproximación a cuatro bandas con  $V_1 = V_2 = V_0 = 0$  se escribe como

$$E = \pm \frac{1}{2} t_{\perp} \pm \sqrt{\frac{1}{4} t_{\perp}^2 + \hbar^2 v_F^2 \mathbf{q}^2}. \quad (2.22)$$

El hecho de que el hamiltoniano sea  $4 \times 4$  lleva a suponer que los coeficientes de las eigenfunciones de onda sean de 4 componentes, de hecho es fácil encontrar que están dadas por las expresiones siguientes

$$\psi_{\pm}^{\beta} = \begin{pmatrix} 1 \\ a_{\pm}^q \\ b_{\pm}^q \\ c_{\pm}^q \end{pmatrix} e^{\pm i q_x x + i q_y y}, \quad (2.23)$$

y

$$\psi_{\pm}^{\beta} = \begin{pmatrix} 1 \\ a_{\pm}^{\beta} \\ b_{\pm}^{\beta} \\ c_{\pm}^{\beta} \end{pmatrix} e^{\pm \beta_x x + i q_y y}. \quad (2.24)$$

Para este caso las expresiones para los eigenvalores son un poco más complejas y se escriben como

$$q_x = \sqrt{-q_y^2 + \frac{1}{2(\hbar v_F)^2} [(V_1 - E)^2 + (V_2 - E)^2] + \frac{1}{2(\hbar v_F)^2} \sqrt{[(V_1 - E)^2 - (V_2 - E)^2]^2 + 4t_{\perp}(V_1 - E)(V_2 - E)}}, \quad (2.25)$$

$$\beta_x = \sqrt{q_y^2 - \frac{1}{2(\hbar v_F)^2}[(V_1 - E)^2 + (V_2 - E)^2] + \frac{1}{2(\hbar v_F)^2} \sqrt{[(V_1 - E)^2 - (V_2 - E)^2]^2 + 4t_\perp(V_1 - E)(V_2 - E)}}. \quad (2.26)$$

Por último los coeficientes de las eigenfunciones son

$$a_\pm^q = -\frac{\hbar v_F(\mp q_x - iq_y)}{E - V_1}, \quad (2.27)$$

$$a_\pm^\beta = -\frac{\hbar v_F(\pm i\beta_x - iq_y)}{E - V_1}, \quad (2.28)$$

$$b_\pm^q = \frac{(E - V_1)^2 - (\hbar v_F)^2(q_x^2 + q_y^2)}{t_\perp(E - V_1)}, \quad (2.29)$$

$$b_\pm^\beta = \frac{(E - V_1)^2 - (\hbar v_F)^2(-\beta_x^2 + q_y^2)}{t_\perp(E - V_1)}, \quad (2.30)$$

$$c_\pm^q = \frac{\hbar v_F(\pm q_x + iq_y)}{E - V_2} b_\pm^q, \quad (2.31)$$

$$c_\pm^\beta = \frac{\hbar v_F(\mp \beta_x + iq_y)}{E - V_2} b_\pm^\beta. \quad (2.32)$$

Se debe tener en cuenta que para obtener las expresiones correspondientes a las regiones de pozo, tenemos que considerar  $V_1 = V_2 = 0$ .

Nuevamente, ahora para este caso, la solución más general para cualquiera de las regiones, ya sea pozo o barrera, se puede expresar como una combinación lineal de las cuatro eigenfunciones encontradas, entonces

$$\psi(x, y) = A_+ \psi_+^q + A_- \psi_-^q + B_+ \psi_+^\beta + B_- \psi_-^\beta, \quad (2.33)$$

en donde  $A_+$ ,  $A_-$ ,  $B_+$ ,  $B_-$  es el conjunto de coeficientes de expansión.

Para formular el método de la matriz de transferencia para este caso, una vez más se tomarán las eigenfunciones y se aplicaran de manera correcta las condiciones de continuidad en cada una de las interfaces de la superred. En este caso se tiene que considerar solo la continuidad de las eigenfunciones a lo largo del eje  $x$ . Para asegurar la continuidad, se debe considerar la conservación de la probabilidad de densidad de corriente y la conservación del momento transversal ( $q_y$ ). Luego para obtener la matriz de transferencia ( $\mathbf{K}$ ) que relaciona los coeficientes de la solución general de las ondas salientes  $\psi(x_R, y)$  en la región semi-infinita derecha (R) como función de los coeficientes de la solución general de las ondas entrantes  $\psi(x_R, y)$  en la región semi-infinita izquierda (L), es decir

$$\begin{pmatrix} A_+(\text{L}) \\ A_-(\text{L}) \\ B_+(\text{L}) \\ B_-(\text{L}) \end{pmatrix} = \mathbf{K} \cdot \begin{pmatrix} A_+(\text{R}) e^{i\kappa_x x_R} \\ A_-(\text{R}) e^{-i\kappa_x x_R} \\ B_+(\text{R}) e^{\alpha_x x_R} \\ B_-(\text{R}) e^{-\alpha_x x_R} \end{pmatrix}; \quad (2.34)$$

aquí  $\kappa_x / \alpha_x$  es el vector de onda  $q_x / \beta_x$  evaluado para  $V_1 = V_2 = 0$ . La matriz  $\mathbf{K}$  definida anteriormente es la matriz de transferencia de coeficientes o bien simplemente matriz de transferencia y se define como

$$\mathbf{K} = D_L^{-1} \cdot \prod_{j=1}^N (D_j \cdot P_j \cdot D_j^{-1}) \cdot D_L, \quad (2.35)$$

donde  $N$  es el número de regiones localizadas entre las regiones semi-infinitas (L, R), es decir, es el número total de barreras y pozos que forman la superred. Al igual que la matriz de transferencia para el Hamiltoniano a dos bandas, está dada en función de matrices que contienen la información de los portadores en cada región, las matriz  $D$  es similar, solo difieren en el valor de los elementos matriciales, pues éstos se definen de diferente manera para cada Hamiltoniano. La matriz  $P$  presenta exactamente la misma forma y los mismos elementos matriciales, la diferencia se encuentra



en la definición de los eigenvalores. Entonces las matrices se definen como

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ a_+^q & a_-^q & a_+^\beta & a_-^\beta \\ b_+^q & b_-^q & b_+^\beta & b_-^\beta \\ c_+^q & c_-^q & c_+^\beta & c_-^\beta \end{pmatrix}; \quad (2.36)$$

$$P = \begin{pmatrix} e^{-iq_x d} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{iq_x d} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\beta_x d} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{\beta_x d} \end{pmatrix}. \quad (2.37)$$

En la ecuación (2.35) el subíndice  $L / j$  indica en que región son evaluadas las matrices  $D$  y  $P$ . El parámetro  $d$  indica el ancho de la región.

La incidencia es en el mismo sentido, de izquierda a derecha, las consideraciones acerca de los coeficientes de las funciones de onda de los portadores son las mismas, eso significa que  $A_-(R) = 0$ ,  $B_+(R) = 0$  y  $B_-(L) = 0$ . Luego la transmitancia  $T$  se define mediante la ecuación

$$T = \left| \frac{A_+(R) e^{i\kappa_x x_R}}{A_+(L)} \right|^2 = \frac{|K_{44}|^2}{|K_{11}K_{44} - K_{14}K_{41}|^2}. \quad (2.38)$$

### 2.3. Relación entre la matriz híbrida y la matriz de transferencia

El modelo de ecuación que se utilizó es la ecuación conocida como Sturm-Liouville Matricial (SLM) [46, 47, 55–57],

$$\frac{d}{dx} \left[ \mathbf{B}(x) \cdot \frac{d\mathbf{F}(x)}{dx} + \mathbf{P}(x) \cdot \mathbf{F}(x) \right] + \mathbf{Y}(x) \cdot \frac{d\mathbf{F}(x)}{dx} + \mathbf{W}(x) \cdot \mathbf{F}(x) = (0). \quad (2.39)$$

Para este sistema de  $N$  ecuaciones diferenciales acopladas se han definido un conjunto de matrices entre las que se encuentra la matriz de transferencia asociada. Esta matriz transfiere las amplitudes  $F$  y la forma lineal asociada  $A$  en un dominio  $\alpha$  de la forma

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(\alpha : x) \\ \mathbf{A}(\alpha : x) \end{vmatrix} = \mathbf{T}(\alpha : x, x_0) \begin{vmatrix} \mathbf{F}(\alpha : x_0) \\ \mathbf{A}(\alpha : x_0) \end{vmatrix}. \quad (2.40)$$

La matriz  $\mathbf{B}$  es de orden  $2N \times 2N$ . La forma lineal asociada es

$$\mathbf{A} = \mathbf{B}(x) \cdot \frac{d\mathbf{F}(x)}{dx} + \mathbf{P}(x) \cdot \mathbf{F}(x). \quad (2.41)$$

Desde nuestro punto de vista, la matriz híbrida simplemente se puede definir cambiando de posición los vectores  $\mathbf{F}(x)$ ,  $\mathbf{A}(x)$ ,  $\mathbf{F}(x_0)$  y  $\mathbf{A}(x_0)$  en (2.40),

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(\alpha : x_0) \\ \mathbf{A}(\alpha : x) \end{vmatrix} = \mathbf{H}(\alpha : x, x_0) \begin{vmatrix} \mathbf{A}(\alpha : x_0) \\ \mathbf{F}(\alpha : x) \end{vmatrix}. \quad (2.42)$$

La matriz Compliance-Stiffness híbrida o simplemente matriz híbrida fue empleada como variable estable para estudios de propagación de una onda acústica en un sistema anisotrópico multi-barreras [54]. Una forma de calcular  $\mathbf{H}$  es mediante su relación con la matriz  $\mathbf{T}$ . De las ecuaciones (2.40) y (2.42) se puede obtener

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} -[\mathbf{T}_{11}]^{-1} \cdot \mathbf{T}_{12} & [\mathbf{T}_{11}]^{-1} \\ \mathbf{T}_{22} - \mathbf{T}_{21} \cdot [\mathbf{T}_{11}]^{-1} \cdot \mathbf{T}_{12} & \mathbf{T}_{21} \cdot [\mathbf{T}_{11}]^{-1} \end{bmatrix}. \quad (2.43)$$

Aquí  $\mathbf{T}_{11}$ ,  $\mathbf{T}_{12}$ ,  $\mathbf{T}_{21}$  y  $\mathbf{T}_{22}$  son las particiones  $N \times N$  de la matriz  $\mathbf{T}$ . Sin embargo llevar las expresiones resultantes de  $\mathbf{H}_{11}$ ,  $\mathbf{H}_{12}$ ,  $\mathbf{H}_{21}$  y  $\mathbf{H}_{22}$  al cálculo numérico en FORTRAN es algo tedioso. Otra manera más fácil de realizar el cálculo mediante la matriz híbrida es presentada en el siguiente apartado.

## 2.4. Matriz híbrida para el Hamiltoniano a dos bandas

La relación de dispersión parabólica a bajas energías de los portadores de carga en doble capa de grafeno es debida al siguiente hamiltoniano

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \begin{pmatrix} 0 & (q_x - ik_y)^2 \\ (q_x + ik_y)^2 & 0 \end{pmatrix} + V(x), \quad (2.44)$$

donde  $q_x$  y  $k_y$  son los vectores de onda en las direcciones  $x$  y  $y$  respectivamente. El sistema a analizar es el de la figura 2.1, donde las barreras son de altura constante, es decir,  $V(x) = V_0$ .



Figura 2.1: Distribución de varias barreras de potencial electrostático.

Se considera homogeneidad en la dirección  $y$  ( $q_y = k_y$ ) y se buscan autofunciones de la forma

$$\psi(x, y) = \begin{vmatrix} \phi(x) \\ \varphi(x) \end{vmatrix} e^{ik_y y}. \quad (2.45)$$

Entonces tomando  $q_x = -i\frac{d}{dx}$  la ecuación de eigenvalores resulta ser

$$\begin{bmatrix} V_0 & \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dx^2} + 2k_y \frac{d}{dx} + k_y^2 \right) \\ \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dx^2} - 2k_y \frac{d}{dx} + k_y^2 \right) & V_0 \end{bmatrix} \begin{vmatrix} \phi(x) \\ \varphi(x) \end{vmatrix} = E \begin{vmatrix} \phi(x) \\ \varphi(x) \end{vmatrix}. \quad (2.46)$$

Para obtener la ecuación SLM se necesita re-escribir la ecuación anterior en la forma

$$\begin{bmatrix} V_0 - E & \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\hbar^2}{m} 2k_y \frac{d}{dx} + \frac{\hbar^2}{2m} k_y^2 \\ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{\hbar^2}{m} 2k_y \frac{d}{dx} + \frac{\hbar^2}{2m} k_y^2 & V_0 - E \end{bmatrix} \begin{vmatrix} \phi(x) \\ \varphi(x) \end{vmatrix} = \mathbf{0}_{2 \times 1}, \quad (2.47)$$

esta ecuación puede ser llevada a la forma general

$$\mathbf{B} \frac{d^2 \mathbf{F}(x)}{dx^2} + (\mathbf{P} + \mathbf{Y}) \frac{d\mathbf{F}(x)}{dx} + \mathbf{W} \cdot \mathbf{F}(x) = \mathbf{0}_{2 \times 1}; \quad \mathbf{F}(x) = \begin{vmatrix} \phi(x) \\ \varphi(x) \end{vmatrix}, \quad (2.48)$$

considerando que

$$\mathbf{B} = \frac{\hbar^2}{2m} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.49)$$

$$\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \frac{\hbar^2}{m} k_y \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.50)$$

$$\mathbf{W} = \frac{\hbar^2}{m} k_y \begin{bmatrix} V_0 - E & \frac{\hbar^2}{2m} k_y^2 \\ \frac{\hbar^2}{2m} k_y^2 & V_0 - E \end{bmatrix}. \quad (2.51)$$

Nótese que  $\mathbf{B}$  es hermítica,  $\mathbf{P} + \mathbf{Y}$  es antihermítica y  $\mathbf{W}$  es hermítica. Estas propiedades garantizan la hermiticidad formal del operador SLM y sus eigenvalores cumplen una propiedad general: pueden ser reales o formar pares del tipo  $(q; q^*)$ .

Las soluciones linealmente independientes (LI) del sistema diferencial (2.48) se pueden plantear de la forma

$$\mathbf{F}(x) = \mathbf{F}_0 e^{iqx}. \quad (2.52)$$

Los eigenvalores  $q$  se obtienen a partir de los ceros del determinante de la matriz secular

$$\Omega(q) = -q^2 \mathbf{B} + iq(\mathbf{P} + \mathbf{Y}) + \mathbf{W}, \quad (2.53)$$

aquí se está en presencia de un problema cuadrático de eigenvalores (QEP). Como la matriz  $\mathbf{B}$  es regular se tendrán un conjunto de 4 eigenvalores y las correspondientes eigenfunciones  $\mathbf{F}_j(x) =$

$\mathbf{F}_{j0} \exp\{iq_j x\}$ ,  $j = 1, 2, 3, 4$ . Por otra parte, dado que también se cumple que  $\mathbf{B}$  es simétrica,  $\mathbf{P} + \mathbf{Y}$  es antisimétrica y  $\mathbf{W}$  es simétrica los eigenvalores formarán pares del tipo  $(q_j; -q_j)$  ya sean reales o complejos.

Las amplitudes  $\mathbf{F}_{j0}$  multiplicadas por una constante (que usualmente se define mediante una condición de normalización) se obtienen a partir del sistema de ecuaciones lineales homogéneas

$$\mathbf{\Omega}(q_j) \cdot \mathbf{F}_{j0} = 0. \quad (2.54)$$

En este problema la matriz secular (2.53) resulta ser

$$\mathbf{\Omega}(q) = \begin{bmatrix} V_0 - E & \frac{\hbar^2}{2m}(iq + k_y)^2 \\ \frac{\hbar^2}{2m}(iq - k_y)^2 & V_0 - E \end{bmatrix}, \quad (2.55)$$

y la anulación de su determinante nos conduce a la ecuación secular

$$\left[ V_0 - E + \frac{\hbar^2}{2m}(q^2 + k_y^2) \right] \left[ V_0 - E - \frac{\hbar^2}{2m}(q^2 + k_y^2) \right] = 0, \quad (2.56)$$

de aquí se pueden obtener las soluciones

$$q_1 = +\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) - k_y^2} = +m, \quad (2.57)$$

$$q_2 = -q_1, \quad (2.58)$$

$$q_3 = -i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) + k_y^2} = -in, \quad (2.59)$$

$$q_4 = -q_3. \quad (2.60)$$

Sustituyendo (2.55) en (2.54) se puede definir

$$\mathbf{F}_{j0} \equiv \begin{vmatrix} \phi_{j0} \\ \varphi_{j0} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{\hbar^2}{2m}(k_y + iq_j)^2 \\ E - V_0 \end{vmatrix}; \quad j = 1, 2, 3, 4. \quad (2.61)$$

Entonces las soluciones LI tendrán la forma

$$\mathbf{F}_j(x) \equiv \psi_j(x) = \begin{vmatrix} \frac{\hbar^2}{2m}(k_y + iq_j)^2 \\ E - V_0 \end{vmatrix} e^{iq_j x}; \quad j = 1, 2, 3, 4, \quad (2.62)$$

y las formas lineales asociadas serán (ver apéndice A)

$$\mathbf{A}_j(x) = \mathbf{A}_{j0} e^{iq_j x} = \begin{vmatrix} \alpha_{j0} \\ \beta_{j0} \end{vmatrix} e^{iq_j x}; \quad j = 1, 2, 3, 4. \quad (2.63)$$

En el caso de la doble capa de grafeno,

$$\mathbf{A}_j(x) = \begin{vmatrix} \frac{\hbar^2}{2m}(E - V_0)(k_y + iq_j)^2 \\ -\frac{\hbar^2}{2m}(E - V_0)(k_y + iq_j)^2 \end{vmatrix} e^{iq_j x}; \quad j = 1, 2, \quad (2.64)$$

$$\mathbf{A}_j(x) = \begin{vmatrix} \frac{\hbar^2}{2m}(E - V_0)(k_y + iq_j)^2 \\ \frac{\hbar^2}{2m}(E - V_0)(k_y + iq_j)^2 \end{vmatrix} e^{iq_j x}. \quad j = 3, 4, \quad (2.65)$$

Antes de definir la matriz híbrida es necesario analizar la solución general en el dominio L y en el dominio R de la figura 2.1,

$$\psi_L(x) = L_1 \begin{vmatrix} \phi_{10w} \\ \varphi_{10w} \end{vmatrix} e^{imx} + L_2 \begin{vmatrix} \phi_{20w} \\ \varphi_{20w} \end{vmatrix} e^{-imx} + L_3 \begin{vmatrix} \phi_{30w} \\ \varphi_{30w} \end{vmatrix} e^{nx} + L_4 \begin{vmatrix} \phi_{40w} \\ \varphi_{40w} \end{vmatrix} e^{-nx}, \quad (2.66)$$

$$\psi_R(x) = R_1 \begin{vmatrix} \phi_{10w} \\ \varphi_{10w} \end{vmatrix} e^{imx} + R_2 \begin{vmatrix} \phi_{20w} \\ \varphi_{20w} \end{vmatrix} e^{-imx} + R_3 \begin{vmatrix} \phi_{30w} \\ \varphi_{30w} \end{vmatrix} e^{nx} + R_4 \begin{vmatrix} \phi_{40w} \\ \varphi_{40w} \end{vmatrix} e^{-nx}. \quad (2.67)$$

Aquí y en adelante cuando el subíndice  $w$  aparezca solo indicará que los parámetros son calculados para un dominio donde  $V_0 = 0$ . Para garantizar la convergencia de  $\psi_L(x)$  en  $-\infty$  y la

convergencia de  $\psi_R(x)$  en  $+\infty$ , los coeficientes  $L_4$  y  $R_3$  deben ser nulos. Además, si se impone la condición de que en  $R$  no tenemos ondas reflejadas se obtiene también que  $R_2 = 0$ .

En este sistema la matriz híbrida para un dominio homogéneo de espesor  $d$  (una barrera o un pozo) tiene la estructura [46, 47, 54–57]

$$\mathbf{H}(d) = \begin{bmatrix} \phi_{10} & \phi_{20} & \phi_{30}e^{iq_3(-d)} & \phi_{40}e^{ik_4(-d)} \\ \varphi_{10} & \varphi_{20} & \varphi_{30}e^{iq_3(-d)} & \varphi_{40}e^{iq_4(-d)} \\ \alpha_{10}e^{iq_1(d)} & \alpha_{20}e^{iq_2(d)} & \alpha_{30} & \alpha_{40} \\ \beta_{10}e^{iq_1(d)} & \beta_{20}e^{iq_2(d)} & \beta_{30} & \beta_{40} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_{10} & \alpha_{20} & \alpha_{30}e^{iq_3(-d)} & \alpha_{40}e^{ik_4(-d)} \\ \beta_{10} & \beta_{20} & \beta_{30}e^{iq_3(-d)} & \beta_{40}e^{iq_4(-d)} \\ \phi_{10}e^{iq_1(d)} & \phi_{20}e^{iq_2(d)} & \phi_{30} & \phi_{40} \\ \varphi_{10}e^{iq_1(d)} & \varphi_{20}e^{iq_2(d)} & \varphi_{30} & \varphi_{40} \end{bmatrix}^{-1}. \quad (2.68)$$

Se debe tener en cuenta que si se trata de un pozo los parámetros  $\phi_{j0}$ ,  $\varphi_{j0}$ ,  $\alpha_{j0}$ ,  $\beta_{j0}$  y las  $q_j$  deben calcularse considerando que  $V_0 = 0$ .

La matriz híbrida que relaciona el campo  $\mathbf{F}(x)$  y la forma lineal asociada  $\mathbf{A}(x)$  de los extremos de sistemas compuestos de varios dominios homogéneos empalmados se obtiene con ayuda de la regla de composición de esta matriz. En el caso de superredes, se consideró que el sistema, que se muestra en la figura 2.1, está compuesto de una barrera empalmada por la derecha a un sistema periódico de  $N$  celdas unidad. Cada celda unidad incluye un pozo que tiene empalmado una barrera por la derecha. Entonces una vez que se tenga la matriz híbrida correspondiente a una barrera y la correspondiente a un pozo, la regla de composición permite obtener la matriz híbrida que relaciona el campo  $\mathbf{F}(x)$  y la forma lineal asociada  $\mathbf{A}(x)$  de los extremos de una celda unidad [46, 47].

Si se denota con  $H_b$  la matriz híbrida correspondiente a una barrera y con  $H_w$  la matriz híbrida correspondiente a un pozo. La matriz híbrida  $H_{wb}$  correspondiente a una celda unidad es

$$H_{wb} = H_b \otimes H_w, \quad (2.69)$$

en donde

$$H_{wb22} = H_b22 + H_b21 \cdot (I_2 - H_w22 \cdot H_b11)^{-1} \cdot H_w22 \cdot H_b12, \quad (2.70)$$

$$H_{wb21} = H_b21 \cdot (I_2 - H_w22 \cdot H_b11)^{-1} \cdot H_w21, \quad (2.71)$$

$$H_{wb12} = H_w12 \cdot [I_2 + H_b11 \cdot (I_2 - H_w22 \cdot H_b11)^{-1} \cdot H_w22] \cdot H_b12, \quad (2.72)$$

$$H_{wb11} = H_w11 + H_w12 \cdot H_b11 \cdot (I_2 - H_w22 \cdot H_b11)^{-1} \cdot H_w21. \quad (2.73)$$

Los términos  $H_b11$ ,  $H_b12$ ,  $H_b21$  y  $H_b22$  representan las particiones de orden  $2 \times 2$  de la matriz  $H_b$ . De forma análoga se han denotado las particiones de orden  $2 \times 2$  correspondientes a la matriz  $H_w$  y a la matriz  $H_w$ . Con  $I_2$  denotamos la matriz identidad de orden 2.

Componiendo la matriz correspondiente a la primera barrera del sistema con la matriz correspondiente a una celda unidad tenemos la matriz híbrida que relaciona el campo  $\mathbf{F}(x)$  y la forma lineal asociada  $\mathbf{A}(x)$  en los extremos de dos barreras. Componiendo la matriz resultante con la de otra celda unidad se consigue la matriz híbrida para tres barreras y así sucesivamente. Denotando con  $H_{si}$  la matriz híbrida correspondiente a  $i$  barreras. El cálculo de esta matriz puede expresarse por medio de las siguientes ecuaciones recurrentes:

$$H_s22_i = H_{wb22} + H_{wb21} \cdot (I_2 - H_s22_{i-1} \cdot H_{wb11})^{-1} \cdot H_s22_{i-1} \cdot H_{wb12}, \quad (2.74)$$

$$H_s21_i = H_{wb21} \cdot (I_2 - H_s22_{i-1} \cdot H_{wb11})^{-1} \cdot H_s21_{i-1}, \quad (2.75)$$

$$H_s12_i = H_s21_{i-1} \cdot [I_2 + H_{wb11} \cdot (I_2 - H_s22_{i-1} \cdot H_{wb11})^{-1} \cdot H_s22_{i-1}] \cdot H_{wb12}, \quad (2.76)$$

$$H_s11_i = H_s11_{i-1} + H_s12_{i-1} \cdot H_{wb11} \cdot (I_2 - H_s22_{i-1} \cdot H_{wb11})^{-1} \cdot H_s21_{i-1}, \quad (2.77)$$



donde  $i \geq 2$ . Para  $i = 1$ :

$$H_s 22_i = H_b 22, \quad (2.78)$$

$$H_s 21_i = H_b 21, \quad (2.79)$$

$$H_s 12_i = H_b 12, \quad (2.80)$$

$$H_s 11_i = H_b 11. \quad (2.81)$$

Denotemos con  $\mathbf{H}(x_r, x_l)$  la matriz híbrida que relaciona campo y la forma lineal asociada en los extremos izquierdo y derecho del sistema de la figura 2.1 dados por las coordenadas  $x_r$  y  $x_l$  respectivamente. Entonces, por definición

$$\begin{bmatrix} \mathbf{F}(x_l) \\ \mathbf{A}(x_r) \end{bmatrix} = \mathbf{H}(x_r, x_l) \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{A}(x_l) \\ \mathbf{F}(x_r) \end{bmatrix}. \quad (2.82)$$

A partir de esta expresión se puede calcular el coeficiente de transmisión

$$T = \left| \frac{R_1}{L_1} \right|^2, \quad (2.83)$$

para ello conviene expresar el campo y la forma lineal asociada en términos de una base de soluciones  $LI$  reducida en  $x_l/x_r$  respectivamente. Entonces, para el dominio externo izquierdo  $L$  se tendrá que

$$\mathbf{F}_L(x) \equiv \psi_L(x) = L_1 \begin{vmatrix} \phi_{10w} \\ \varphi_{10w} \end{vmatrix} e^{im(x-x_l)} + L_2 \begin{vmatrix} \phi_{20w} \\ \varphi_{20w} \end{vmatrix} e^{-im(x-x_l)} + L_3 \begin{vmatrix} \phi_{30w} \\ \varphi_{30w} \end{vmatrix} e^{n(x-x_l)}, \quad (2.84)$$

$$\mathbf{A}_L(x) = L_1 \begin{vmatrix} \alpha_{10w} \\ \beta_{10w} \end{vmatrix} e^{im(x-x_l)} + L_2 \begin{vmatrix} \alpha_{20w} \\ \beta_{20w} \end{vmatrix} e^{-im(x-x_l)} + L_3 \begin{vmatrix} \alpha_{30w} \\ \beta_{30w} \end{vmatrix} e^{n(x-x_l)}, \quad (2.85)$$

y para el dominio externo derecho  $R$

$$\mathbf{F}_R(x) \equiv \psi_R(x) = R_1 \begin{vmatrix} \phi_{10w} \\ \varphi_{10w} \end{vmatrix} e^{im(x-x_r)} + R_4 \begin{vmatrix} \phi_{40w} \\ \varphi_{40w} \end{vmatrix} e^{-n(x-x_r)}, \quad (2.86)$$

$$\mathbf{A}_R(x) = R_1 \begin{vmatrix} \alpha_{10w} \\ \beta_{10w} \end{vmatrix} e^{im(x-x_r)} + R_4 \begin{vmatrix} \alpha_{40w} \\ \beta_{40w} \end{vmatrix} e^{-n(x-x_r)}. \quad (2.87)$$

Con ayuda de las expresiones (2.82) a la (2.83) se obtiene que

$$\begin{vmatrix} \frac{L_2}{L_1} \\ \frac{L_3}{L_1} \\ \frac{R_1}{L_1} \\ \frac{R_4}{L_1} \end{vmatrix} = [\mathbf{M}_1 - \mathbf{H}(x_r, x_l) \cdot \mathbf{M}_2]^{-1} \cdot \left\{ \mathbf{H}(x_r, x_l) \cdot \begin{matrix} \alpha_{10w} & \phi_{10w} \\ \beta_{10w} & \varphi_{10w} \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{matrix} \right\}, \quad (2.88)$$

donde

$$\mathbf{M}_1 = \begin{pmatrix} \phi_{20w} & \phi_{30w} & 0 & 0 \\ \varphi_{20w} & \varphi_{30w} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{10w} & \alpha_{40w} \\ 0 & 0 & \beta_{10w} & \alpha_{40w} \end{pmatrix}, \quad (2.89)$$

$$\mathbf{M}_2 = \begin{pmatrix} \alpha_{20w} & \alpha_{30w} & 0 & 0 \\ \beta_{20w} & \alpha_{30w} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \phi_{10w} & \phi_{40w} \\ 0 & 0 & \varphi_{10w} & \varphi_{40w} \end{pmatrix}. \quad (2.90)$$

La transmitancia estará dada por la ecuación (2.83).

## 2.5. Matriz híbrida para el Hamiltoniano a cuatro bandas

Tomando en cuenta la ecuación de eigenvalores

$$\mathbf{H} \cdot \mathbf{F} = E\mathbf{I} \cdot \mathbf{F}, \quad (2.91)$$

$$(\mathbf{H} - E\mathbf{I}) \cdot \mathbf{F} = \mathbf{0}_{4 \times 1}, \quad (2.92)$$

sustituyendo el Hamiltoniano

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} V_1 - E & i\hbar v_F(-\frac{d}{dx} + q_y) & t_{\perp} & 0 \\ -i\hbar v_F(\frac{d}{dx} + q_y) & V_1 - E & 0 & 0 \\ t_{\perp} & 0 & V_2 - E & -i\hbar v_F(\frac{d}{dx} + q_y) \\ 0 & 0 & i\hbar v_F(-\frac{d}{dx} + q_y) & V_2 - E \end{pmatrix} \cdot \mathbf{F} = \mathbf{0}_{4 \times 1}, \quad (2.93)$$

reacomodando términos,

$$-i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{d\mathbf{F}(x)}{dx} + \begin{pmatrix} V_1 - E & i\hbar v_F q_y & t_{\perp} & 0 \\ -i\hbar v_F q_y & V_1 - E & 0 & 0 \\ t_{\perp} & 0 & V_2 - E & -i\hbar v_F q_y \\ 0 & 0 & i\hbar v_F q_y & V_2 - E \end{pmatrix} \cdot \mathbf{F}(x) = \mathbf{0}_{4 \times 1}. \quad (2.94)$$

Por último mediante operaciones básicas matriciales,

$$\frac{d\mathbf{F}(x)}{dx} + \begin{pmatrix} q_y & i\frac{V_1-E}{\hbar v_F} & 0 & 0 \\ i\frac{V_1-E}{\hbar v_F} & -q_y & i\frac{t_\perp}{\hbar v_F} & 0 \\ 0 & 0 & -q_y & i\frac{V_2-E}{\hbar v_F} \\ i\frac{t_\perp}{\hbar v_F} & 0 & i\frac{V_2-E}{\hbar v_F} & q_y \end{pmatrix} \cdot \mathbf{F}(x) = \mathbf{0}_{4 \times 1}. \quad (2.95)$$

Si se propone una solución en la forma

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_0 e^{iqx}, \quad (2.96)$$

sustituyendo en la ecuación (2.95) se obtiene

$$\begin{pmatrix} q_y + iq & i\frac{V_1-E}{\hbar v_F} & 0 & 0 \\ i\frac{V_1-E}{\hbar v_F} & -q_y & i\frac{t_\perp}{\hbar v_F} & 0 \\ 0 & 0 & -q_y + iq & i\frac{V_2-E}{\hbar v_F} \\ i\frac{t_\perp}{\hbar v_F} & 0 & i\frac{V_2-E}{\hbar v_F} & q_y + iq \end{pmatrix} \cdot \mathbf{F}_0 = \Theta(q) \cdot \mathbf{F}_0 = \mathbf{0}_{4 \times 1}. \quad (2.97)$$

Para determinar los valores  $q$  que anulan el determinante de la matriz secular  $\Theta(q)$  se debe resolver una ecuación de cuarto orden en  $q$ . Luego se obtienen expresiones analíticas para los cuatro eigenvalores:

$$q = \pm \sqrt{-q_y^2 - \frac{1}{2(\hbar v_F)^2} [(E - V_1)^2 + (E - V_2)^2] \pm \frac{1}{2(\hbar v_F)^2} \sqrt{[(E - V_1)^2 - (E - V_2)^2]^2 + 4t_\perp(E - V_1)(E - V_2)}}. \quad (2.98)$$

Estos eigenvalores aparecen por pares del tipo  $(q, -q)$ . Considerando los pares  $(q_1, -q_1)$  y  $(q_2, -q_2)$  y las correspondientes autofunciones dadas por

$$\mathbf{F}_{0j}^\pm = (a_j, b_j^\pm, c_j, d_j^\pm)^T, \quad j = 1, 2. \quad (2.99)$$

en donde las componentes son

$$a_j = i \frac{E - V_1}{\hbar v_F}; \quad (2.100)$$

$$b_j^\pm = q_y \pm iq_j; \quad (2.101)$$

$$c_j = \frac{i}{t_\perp \hbar v_F} [(E - V_1)^2 - (q_y^2 + q_j^2)(\hbar v_F)^2]; \quad (2.102)$$

$$d_j^\pm = \frac{t_\perp^2 (E - V_1) - (E - V_2)[(E - V_1)^2 - (q_y^2 + q_j^2)(\hbar v_F)^2]}{(q_y \pm iq_j)t_\perp (\hbar v_F)^2}. \quad (2.103)$$

La selección de las anteriores expresiones es para tratar de evitar lo más posible que puedan indefinirse por la nulidad de algún denominador. Por lo tanto las soluciones linealmente independientes pueden expresarse en la forma

$$\mathbf{F}_{01}^+ e^{iq_1 x}, \mathbf{F}_{01}^- e^{-iq_1 x}, \mathbf{F}_{02}^+ e^{iq_2 x}, \mathbf{F}_{02}^- e^{-iq_2 x}. \quad (2.104)$$

Cualquier solución general  $\mathbf{F}(x)$  puede expresarse como una combinación lineal de estas soluciones linealmente independientes. En forma matricial, esta combinación puede escribirse como

$$\mathbf{F}(x) = \begin{pmatrix} a_1 e^{iq_1 x} & a_2 e^{iq_2 x} & a_1 e^{-iq_1 x} & a_2 e^{-iq_2 x} \\ b_1^+ e^{iq_1 x} & b_2^+ e^{iq_2 x} & b_1^- e^{-iq_1 x} & b_2^- e^{-iq_2 x} \\ c_1 e^{iq_1 x} & c_2 e^{iq_2 x} & c_1 e^{-iq_1 x} & c_2 e^{-iq_2 x} \\ d_1^+ e^{iq_1 x} & d_2^+ e^{iq_2 x} & d_1^- e^{-iq_1 x} & d_2^- e^{-iq_2 x} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1^+ \\ \alpha_2^+ \\ \alpha_1^- \\ \alpha_2^- \end{pmatrix}. \quad (2.105)$$

La idea es usar un método que sea estable numéricamente, como el Hamiltoniano no involucra derivadas no se puede aplicar directamente el método de la matriz híbrida, método numéricamente estable en comparación con el método de la matriz de transferencia, que es susceptible de padecer degradación numérica en sistemas basados en doble capa de grafeno. Entonces para encontrar una matriz híbrida numéricamente estable para algún dominio homogéneo (en este caso barrera o pozo) se expresará la ecuación anterior por medio de bloques matriciales

$$\mathbf{F}(x) = \begin{pmatrix} Up(x) \\ Dw(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^+(x) & U^-(x) \\ D^+(x) & D^-(x) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha^+ \\ \alpha^- \end{pmatrix} \quad (2.106)$$

como  $\mathbf{F}(x)$  es un vector de cuatro componentes, entonces  $Up(x)$  es un vector columna formado por las dos primeras componentes y  $Dw(x)$  es un vector columna formado por las otras dos componentes, eso significa que  $U^\pm(x)$  y  $D^\pm(x)$  son respectivamente bloques de  $2 \times 2$  de la matriz  $4 \times 4$  en la ecuación (2.105). Luego usando la definición de matriz híbrida, los vectores  $Up(x)$  y  $Dw(x)$  están relacionados por la siguiente ecuación matricial

$$\begin{pmatrix} Up(x_0) \\ Dw(x_0 + d) \end{pmatrix} = \mathbf{H}(x_0 + d, x_0) \cdot \begin{pmatrix} Dw(x_0) \\ Up(x_0 + d) \end{pmatrix} \quad (2.107)$$

y haciendo uso de las ecuaciones 2.106 y 2.107 se obtiene que

$$\mathbf{H}(x_0 + d, x_0) = \begin{pmatrix} U^+(x_0) & U^-(x_0) \\ D^+(x_0 + d) & D^-(x_0 + d) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} D^+(x_0) & D^-(x_0) \\ U^+(x_0 + d) & U^-(x_0 + d) \end{pmatrix}^{-1} \quad (2.108)$$

o bien, explícitamente

$$\mathbf{F}(x) = \begin{pmatrix} a_1 e^{iq_1 x_0} & a_2 e^{iq_2 x_0} & a_1 e^{-iq_1 x_0} & a_2 e^{-iq_2 x_0} \\ b_1^+ e^{iq_1 x_0} & b_2^+ e^{iq_2 x_0} & b_1^- e^{-iq_1 x_0} & b_2^- e^{-iq_2 x_0} \\ c_1 e^{iq_1(x_0+d)} & c_2 e^{iq_2(x_0+d)} & c_1 e^{-iq_1(x_0+d)} & c_2 e^{-iq_2(x_0+d)} \\ d_1^+ e^{iq_1(x_0+d)} & d_2^+ e^{iq_2(x_0+d)} & d_1^- e^{-iq_1(x_0+d)} & d_2^- e^{-iq_2(x_0+d)} \end{pmatrix} \quad (2.109)$$

$$\cdot \begin{pmatrix} c_1 e^{iq_1 x_0} & c_2 e^{iq_2 x_0} & c_1 e^{-iq_1 x_0} & c_2 e^{-iq_2 x_0} \\ d_1^+ e^{iq_1 x_0} & d_2^+ e^{iq_2 x_0} & d_1^- e^{-iq_1 x_0} & d_2^- e^{-iq_2 x_0} \\ a_1 e^{iq_1(x_0+d)} & a_2 e^{iq_2(x_0+d)} & a_1 e^{-iq_1(x_0+d)} & a_2 e^{-iq_2(x_0+d)} \\ b_1^+ e^{iq_1(x_0+d)} & b_2^+ e^{iq_2(x_0+d)} & b_1^- e^{-iq_1(x_0+d)} & b_2^- e^{-iq_2(x_0+d)} \end{pmatrix}, \quad (2.110)$$

ésta es la matriz híbrida para un dominio homogéneo. Para obtener la matriz híbrida de una heteroestructura es necesario aplicar la regla de composición de esta matriz para luego calcular fácilmente las propiedades de transmisión y transporte [46, 47].

Primeramente, para calcular la transmitancia, se supone que los extremos tienen coordenadas  $x_L$  (extremo izquierdo) y  $x_R$  (extremo derecho). Se asumirá que la onda  $F_{01}^+ e^{iq_1 x}$  incide por el extremo derecho y de ello resultan dos ondas reflejadas  $F_{01}^- e^{-iq_1 x}$  y  $F_{02}^- e^{-iq_2 x}$  en este dominio. Mientras que en el extremo derecho solo se tendrán las ondas transmitidas  $F_{01}^+ e^{iq_1 x}$  y  $F_{02}^+ e^{iq_2 x}$ . Después de encontrar la matriz híbrida correspondiente, el vector de la ecuación (2.107) puede escribirse como

$$\begin{pmatrix} Up(x_L) \\ Dw(x_R) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{1L}\alpha_{1L}^+ + a_{1L}\alpha_{1L}^- + a_{2L}\alpha_{2L}^- \\ b_{1L}^+\alpha_{1L}^+ + b_{1L}^-\alpha_{1L}^- + b_{2L}^-\alpha_{2L}^- \\ c_{1R}\alpha_{1R}^+ + c_{2R}\alpha_{2R}^+ \\ d_{1R}^+\alpha_{1R}^+ + d_{2R}^+\alpha_{2R}^+ \end{pmatrix}, \quad (2.111)$$

y

$$\begin{pmatrix} Dw(x_L) \\ Up(x_R) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{1L}\alpha_{1L}^+ + c_{1L}\alpha_{1L}^- + c_{2L}\alpha_{2L}^- \\ d_{1L}^+\alpha_{1L}^+ + d_{1L}^-\alpha_{1L}^- + d_{2L}^-\alpha_{2L}^- \\ a_{1R}\alpha_{1R}^+ + a_{2R}\alpha_{2R}^+ \\ b_{1R}^+\alpha_{1R}^+ + b_{2R}^+\alpha_{2R}^+ \end{pmatrix}. \quad (2.112)$$

Considerando la base reducida en  $x_L$  y  $x_R$ , donde los subíndices indican los extremos del dominio donde los coeficientes y parámetros han sido calculados. Es fácil verificar que  $r_1 = \alpha_{1L}^-/\alpha_{1L}^+$ ,  $r_2 = \alpha_{2L}^-/\alpha_{1L}^+$ ,  $t_1 = \alpha_{1R}^+/\alpha_{1L}^+$  y  $t_2 = \alpha_{2R}^+/\alpha_{1L}^+$ . Con lo anterior la ecuación (2.107) puede tomar la forma

$$\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2 \cdot \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ t_1 \\ t_2 \end{pmatrix} = \mathbf{H}(x_R, x_L) \cdot \mathbf{M}_3 + \mathbf{H}(x_R, x_L) \cdot \mathbf{M}_4 \cdot \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ t_1 \\ t_2 \end{pmatrix}, \quad (2.113)$$

donde las matrices usadas  $\mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2, \mathbf{M}_3$  y  $\mathbf{M}_4$  son

$$\mathbf{M}_1 = \begin{pmatrix} a_{1L} & 0 & 0 & 0 \\ b_{1L}^+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M}_2 = \begin{pmatrix} a_{1L} & a_{2L} & 0 & 0 \\ b_{1L}^- & b_{2L}^- & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_{1R} & c_{2R} \\ 0 & 0 & d_{1R}^+ & c_{2R}^+ \end{pmatrix}, \quad (2.114)$$

$$\mathbf{M}_3 = \begin{pmatrix} c_{1L} & 0 & 0 & 0 \\ d_{1L}^+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{M}_4 = \begin{pmatrix} c_{1L} & c_{2L} & 0 & 0 \\ d_{1L}^- & d_{2L}^- & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{1R} & a_{2R} \\ 0 & 0 & b_{1R}^+ & b_{2R}^+ \end{pmatrix}, \quad (2.115)$$

finalmente se llega a la siguiente ecuación matricial

$$\begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ t_1 \\ t_2 \end{pmatrix} = [\mathbf{M}_2 - \mathbf{H}(x_R, x_L) \cdot \mathbf{M}_4]^{-1} \cdot [\mathbf{H}(x_R, x_L) \cdot \mathbf{M}_3 - \mathbf{M}_1]. \quad (2.116)$$

y con ello obtener la transmitancia como  $T = \frac{1}{|t_1|^2}$ .

## 2.6. Conductancia en el régimen lineal

Cuando ya se ha calculado la transmitancia, es fácil implementar un método para el cálculo de las propiedades de transporte, particularmente, la conductancia [59]. Para ello es necesario utilizar



el formalismo de Landauer-Büttiker, para más detalles veáse la referencia [59]. La conductancia en el régimen lineal puede obtenerse directamente de la transmitancia, mediante la suma de todos los canales de transmisión. Entonces utilizando el formalismo de Landauer-Büttiker se puede calcular la fórmula para la conductancia en el régimen lineal para la doble capa de grafeno [47], si se considera una muestra de manera que su longitud en la dirección de propagación (para este caso el eje  $x$ ) es  $L_x$  sea mucho menor que su longitud en la dirección transversal (eje  $y$ ), y tomando en cuenta que  $E_F$  es la energía de Fermi de los electrones de Dirac, la conductancia puede escribirse como

$$G(E_F) = \frac{2e^2}{h} \int_{-\frac{E_F}{\hbar v_F}}^{\frac{E_F}{\hbar v_F}} T(E_F, k_y) \frac{dk_y}{2\pi/L_y}, \quad (2.117)$$

si se cambia a la variable  $\theta$  por medio de la relación  $k_y = \frac{E_F}{\hbar v_F} \sin \theta$ , se podrá escribir la expresión anterior como el promedio angular de la probabilidad de transmisión, es decir

$$G(E_F) = \frac{2e^2 L_y E_F}{h^2 v_F} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} T(E_F, \theta) \cos \theta d\theta, \quad (2.118)$$

si normalizamos la energía de Fermi  $E_F$  al alto de barrera  $E(0)$ ,  $E_F^* = E_F/E_0$ , se puede obtener finalmente

$$\frac{G(E_F^*)}{G_0} = E_F^* \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} T(E_F^*, \theta) \cos \theta d\theta, \quad (2.119)$$

donde

$$G_0 = \frac{2e^2 L_y E_0}{h^2 v_F}, \quad (2.120)$$

es el factor fundamental de conductancia.

Actualmente, en la investigación de las propiedades de transporte en sistemas basados en doble capa de grafeno es difícil controlar el ángulo de incidencia de los electrones, sin embargo ya existen ciertas técnicas avanzadas experimentales para discriminar la contribución angular de

los electrones en las propiedades de transporte [60–63], esto puede hacerse mediante la inclinación planar de los electrodos superiores en la muestra, entonces para tomar en cuenta la contribución de la discriminación angular en la conductancia se puede tomar la ecuación (2.119) y reducir los límites angulares de integración [47], entonces

$$\frac{G^{\Delta\theta}}{G_0} = E_F^* \int_{-\theta}^{\theta} T(E_F^*, \theta) \cos \theta d\theta. \quad (2.121)$$

Esta expresión sirve como herramienta para conocer la forma particular de las curvas de conductancia en el intervalo angular  $(-\theta, \theta)$  en que las resonancias Fano dominan el transporte.



## Resultados

En este capítulo se presentan los resultados de los trabajos en el orden de su publicación. Como primera parte se mostrará que la matriz de transferencia presenta inestabilidades numéricas en el análisis numérico de superredes basadas en doble capa de grafeno y como el método de la matriz híbrida corrige tales inestabilidades. En segundo lugar un análisis detallado de la aparición de resonancias Fano en las propiedades de transmisión y su huella en el transporte en sistemas de una, dos y superredes basadas en doble capa de grafeno. Un tercer trabajo muestra de que manera afecta a las resonancias Fano la no parabolicidad y la apertura del gap.

### **3.1. El problema $\Omega d$ en superredes de doble capa de grafeno**

En la actualidad, cuando se trata de realizar los cálculos numéricos para encontrar las propiedades de transmisión y transporte en sistemas multibarreras o bien cuando se está interesado en la propagación de ondas a través de estos sistemas, una de las técnicas más comunes para tal análisis es el método de la matriz de transferencia [52, 53]. Cuando esta técnica es desarrollada para un tipo de onda, su aplicación a cualquier otro tipo es relativamente fácil. Este método facilita la transición de las variables de la propagación de ondas de un dominio a otro mediante ciertas

condiciones interfaciales, el método es fácil de aplicar en principio, sin embargo se ha demostrado que sufre de inestabilidades numéricas que dependen del tamaño del sistema a analizar [54–57].

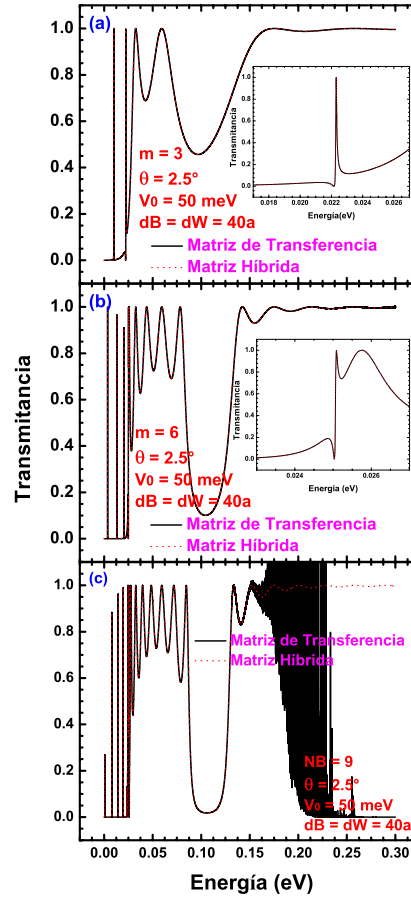


Figura 3.1: Comparación de la transmitancia como función de la energía para la matriz de transferencia (línea negra sólida) y la matriz híbrida (línea roja punteada) para una superred basada en doble capa de grafeno. El ancho de barreras y pozos es de  $40a$ , el ángulo de incidencia es de  $2.5^\circ$ , el alto de las barreras es  $50 \text{ meV}$ . Las figuras (a), (b) and (c) corresponden al número de barreras 3, 6 and 9, respectivamente. El zoom insertado en (a) y (b) muestra el perfil Fano y su energía de localización en el rango de energías.

En nuestro caso se demuestra que la aplicación práctica de la matriz de transferencia al estudio de las propiedades de transmisión y transporte en superredes basadas en doble capa de grafeno se ve afectada por tales inestabilidades numéricas conocidas como Problema  $\Omega d$  y su vez que el método de la matriz híbrida es un método estable que evade tal problema y da resultados confiables para los mismos sistemas. Luego como el interés es analizar con detalle la aparición de las

resonancias Fano y su huella en las propiedades de transporte, ambos métodos determinaron adecuadamente las resonancias Fano sin embargo el hecho de que la matriz de transferencia presente el problema  $\Omega d$  en la transmitancia dificulta la obtención de las propiedades de transporte como la conductancia, pues ésta depende de la primera.

Para esquematizar con más detalle, la Figura 3.1 muestra los cálculos para la transmitancia como función de la energía para un ángulo pequeño como  $\theta = 2.5^\circ$  al cual las resonancias Fano pueden manifestarse (aparecen a ángulos pequeños), el sistema es periódico por lo tanto el ancho de barreras y pozos es de  $40a \approx 5.7$  nm ( $a = 0.142$  nm) y el alto de las barreras es de  $V_0 = 50$  meV. El parámetro a variar fue el número de barreras  $m$ , las figuras 3.1a, b y c corresponden a  $m = 3$ ,  $m = 6$  y  $m = 9$ , respectivamente. Se observó que ambos métodos obtuvieron resultados similares para el caso de 3 y 6 barreras pero en el caso de 9 barreras los resultados difieren bastante, pues el problema  $\Omega d$  aparece para el método de la matriz de transferencia. El problema  $\Omega d$  en este caso se debe a la multiplicación de matrices que forman la matriz de transferencia y que llevan como argumento el producto  $\beta_x d$  (es decir, las matrices de propagación), como la matriz de transferencia está dada en términos de productos de matrices dinámicas y de propagación que se van acumulando cuando el número de barreras crece entonces el problema  $\Omega d$  se vuelve acumulativo y comienza a dominar en los cálculos [54–57]. Caso contrario lo que sucede para la matriz híbrida, que presenta muy buena estabilidad numérica sin importar el número de barreras.

Una manera para determinar si los resultados son correctos es tomar del determinante de las matrices involucradas y verificar que sean unimodulares. Para ello en la Figura 3.2 se muestran los cálculos para el módulo del determinante para las matrices híbrida y de transferencia usando los mismos parámetros que en la figura 3.1. Se puede observar que la matriz híbrida en todos los casos es invariablemente unimodular, sin importar el número de barreras el determinante de la matriz híbrida siempre es uno. Por otro lado el módulo del determinante de la matriz de transferencia difiere de uno, incluso en algunos casos su valor crece varios órdenes de magnitud, siendo más evidente cuando el tamaño del sistema incrementa. De hecho si el ángulo de incidencia y los anchos

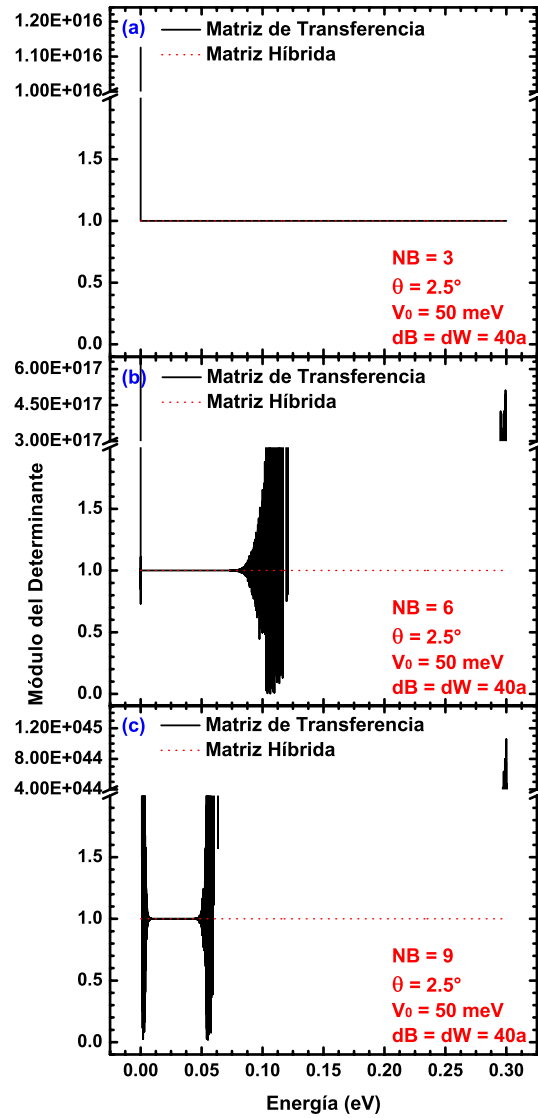


Figura 3.2: Módulo del determinante en función de la energía para una superred basada en doble capa de grafeno, los parámetros son los mismos que en la Figura 3.1.

de las regiones son grandes, la matriz híbrida mantiene su carácter unimodular, esto se puede ver en la Figura 3.3. Cabe aclarar que en la obtención de la transmitancia solo se utilizaron cuatro elementos de la matriz de transferencia mientras que en el módulo del determinante utilizamos todos los elementos de la matriz, por lo tanto algunos elementos que contribuyen al problema  $\Omega d$  no contribuyen a la obtención de la transmitancia. Por otro lado también se pueden observar ciertas

inestabilidades para el determinante de la matriz de transferencia cerca del cero de energía debidas al resultado de tomar en cuenta la base de eigenfunciones usada para construir tal matriz, en el denominador de las expresiones para  $v_{\pm}^q$  y  $v_{\pm}^{\beta}$  aparece la energía  $E$ , lo que significa que en las regiones donde no existe potencial en valores de energía cercanos a cero el valor tiende a ser muy grande.

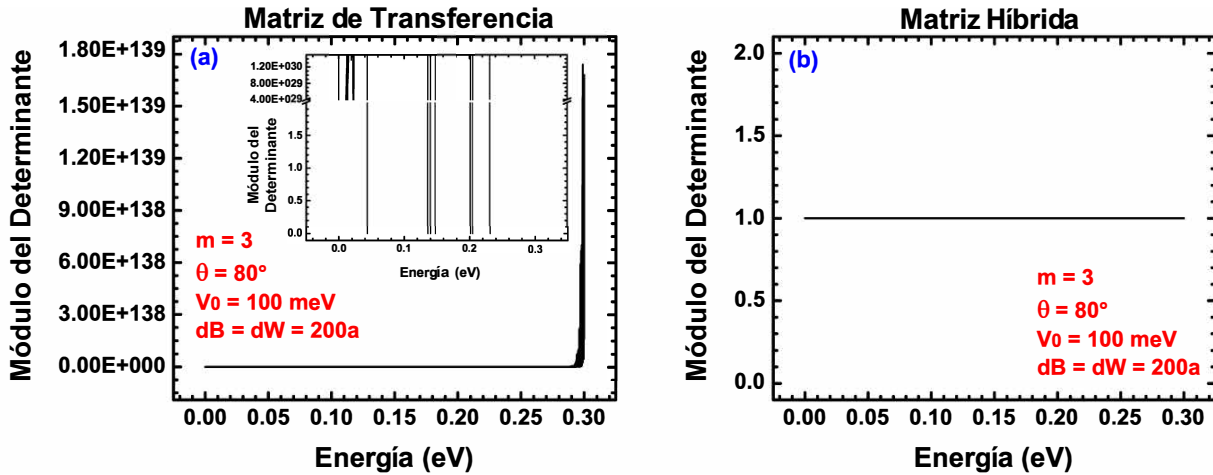


Figura 3.3: Módulo del determinante en función de la energía para una superred basada en doble capa de grafeno. El ancho de las barreras y pozos es de  $200a$ , el ángulo de incidencia de los electrones es de  $80^\circ$ , el alto de las barreras es de  $100 \text{ meV}$  y el número de barreras es 3.

Un esquema más completo se puede ver en la figura 3.4, en ella se muestran los diagramas de contorno  $(E, \theta)$ . La transmitancia fue calculada usando tanto el método de la matriz híbrida como el método de la matriz de transferencia. Los parámetros fijos son  $dB = dW = 40a$  y  $V_0 = 50 \text{ meV}$ , el análisis se hace tomando en cuenta la variación del número de barreras como en la Figura 3.1. Los puntos negros que están indicados por las flechas blancas en la figura 3.4a son las inestabilidades que surgen cerca del cero de energía y que explicamos antes para el módulo del determinante de la matriz de transferencia en las figuras 3.2 y 3.3. La Figura 3.4c muestra como la degradación numérica afecta los cálculos realizados con la matriz de transferencia cuando la energía y el ángulo de incidencia son grandes y va aumentando fuertemente su efecto con el incremento del número de barreras, Figura 3.4e.



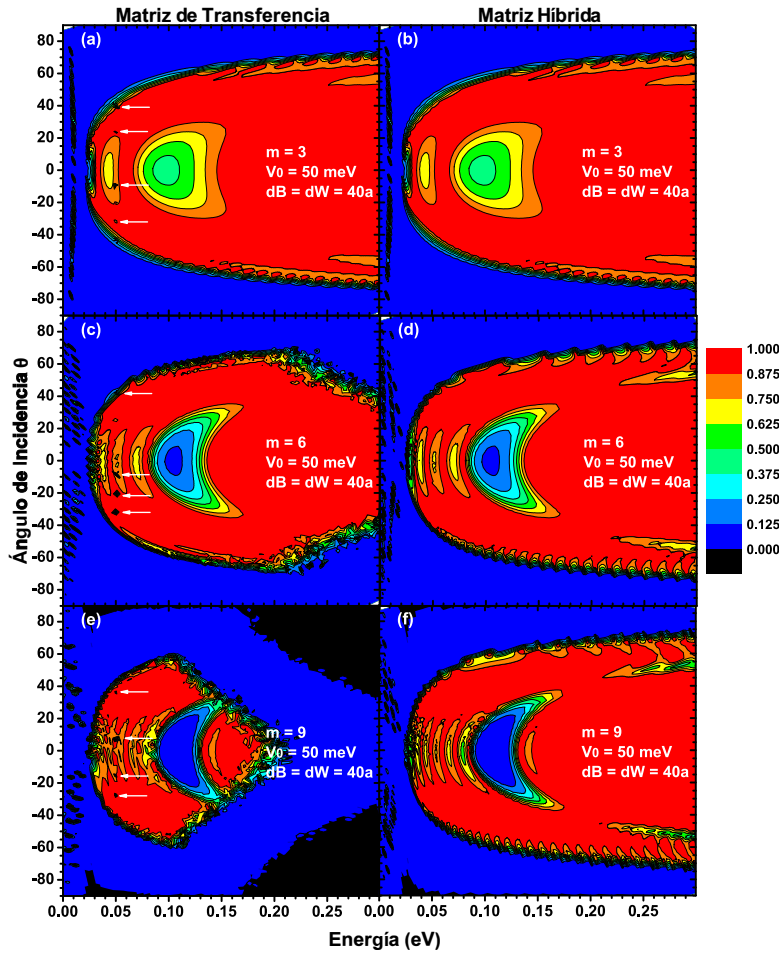


Figura 3.4: Diagrama de contorno  $(E, \theta)$  para una superred basada en doble capa de grafeno. La primera columna corresponde a los resultados de la matriz de transferencia, y la segunda a la matriz híbrida. La primera ((a) y (b)), segunda ((c) y (d)), y tercera ((e) y (f)) filas corresponden a 3, 6 y 9 barreras. Los parámetros son los mismos que en la Figura 3.1.

La dramática desaparición del contorno en la Figura 3.4e se vuelve más notable con el incremento de los anchos de los pozos y barreras, aún cuando el número de barreras no sea grande. Lo anterior se puede observar en la Figura 3.5, en estos gráficos el problema  $\Omega d$  causa una pérdida de información física importante relacionada con las resonancias Fano en regiones de perfecta transmisión así como información relacionada con el antitunelaje Klein. Pero se puede notar que los cálculos realizados con la matriz híbrida son estables y fiables sin importar el valor de los parámetros del sistema. Por lo tanto se concluye de las Figuras 3.4 y 3.5 que el problema  $\Omega d$  presente en los cálculos realizados por el método de la matriz de transferencia es bastante sensible a la energía

de los electrones, al ángulo de incidencia y al tamaño del sistema.

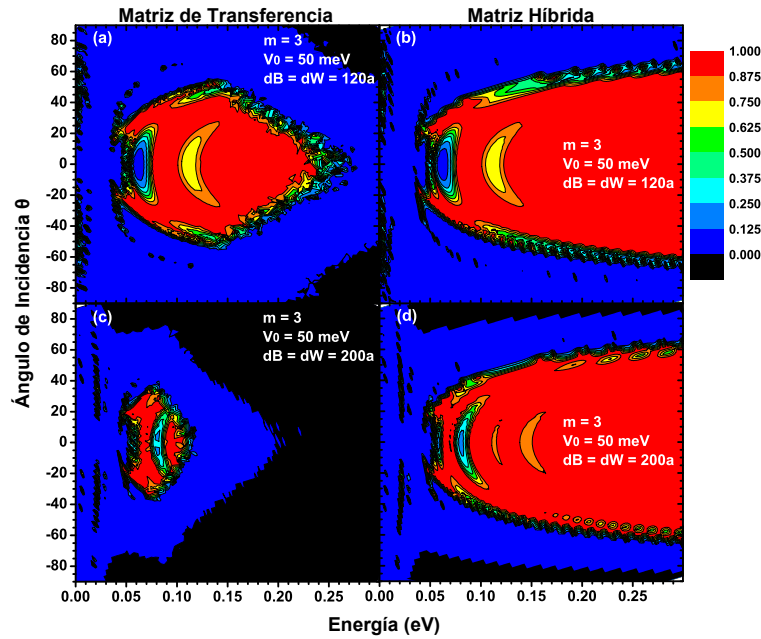


Figura 3.5: Diagrama de contorno  $(E, \theta)$  para una superred basada en doble capa de grafeno. La primera columna corresponde a los resultados de la matriz de transferencia, y la segunda a la matriz híbrida. El número de barreras es  $m = 3$  y el alto de las barreras es  $V_0 = 50$  meV. Los anchos de pozos y barreras son:  $120a$  ((a) y (b)), y  $200a$  ((c) y (d)).

Para terminar con el análisis de la degradación numérica en la matriz de transferencia, cabe resaltar algunos detalles importantes, si bien ambos métodos, tanto la matriz de transferencia como la matriz híbrida calculan adecuadamente la transmitancia y la región donde aparecen las resonancias Fano, sin embargo, la transmitancia no puede ser medida directamente en laboratorios científicos que trabajen con grafeno. Pero existe otra cantidad física que sí puede ser observable, la conductancia. Esta cantidad tiene dos características de interés, puede ser observada en laboratorio, y está directamente relacionada con la transmitancia. La conductancia puede obtenerse del promedio angular de la transmitancia, por lo tanto, todos los ángulos de incidencia son relevantes. Eso significa que mientras el método de la matriz de transferencia pueda calcular las resonancias Fano adecuadamente, resultará sencillo obtener la conductancia con este método. Sin embargo hay un ligero detalle, cuando se trata de superredes las resonancias Fano pueden acoplarse con las mi-

nibandas naturales del sistema (ver Figuras 3.6-3.8), este detalle puede ser significativo porque las resonancias Fano dejarán una huella distintiva en la minibanda y por lo tanto se podrán observar en la conductancia.

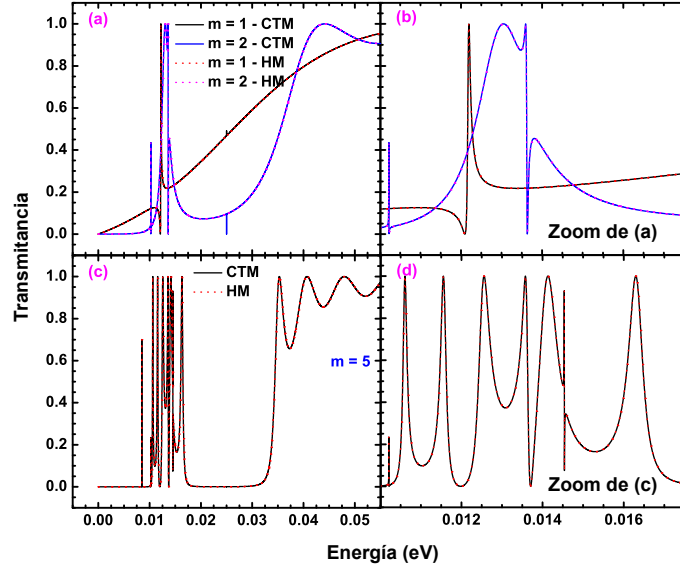


Figura 3.6: Evolución de las resonancias Fano a medida que el número de barreras aumenta. Las minibandas naturales surgen en una estructura periódica, pero en superredes basadas en doble capa de grafeno las minibandas podrían acoplarse con las resonancias Fano, dando lugar a perfiles o formas muy peculiares en la transmitancia. En (a) presentamos la transmitancia para un sistema de una (líneas negra sólida y roja punteada) y dos barreras (línea azul sólida y magenta punteada), en este caso la transmitancia no presenta inestabilidades numéricas y fue calculada con ambos métodos, el método de la matriz de transferencia y el método de la matriz híbrida. En (c) presentamos la transmitancia para el caso de cinco barreras ( $m = 5$ ) donde la línea negra sólida y línea la roja punteada corresponden a CTM y HB, respectivamente. Los incisos (b) y (d) son los zooms de (a) y (c). Los parámetros del sistema son:  $V_0 = 25$  meV,  $dB = dW = 100a$  and  $\theta = 2.5^\circ$ .

Pero surge un problema, si el número de barreras y/o el ancho de las mismas es grande la degradación numérica tomara presencia y destruirá en su mayoría la transmitancia, especialmente afectará al acoplamiento entre las minibandas y las resonancias Fano. Esto se puede ver a detalle en los zooms de las Figuras 3.7 y 3.8.

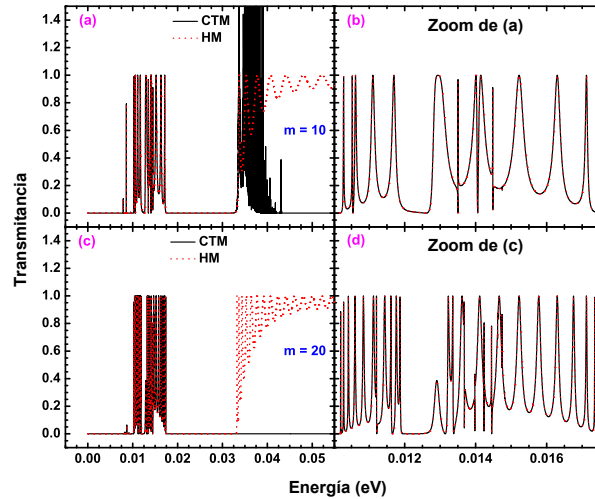


Figura 3.7: Transmitancia versus energía para una superred basada en doble capa de grafeno con un número de barreras igual a: (a)  $m = 10$  and (c)  $m = 20$ . Los parámetros son los mismos que en la Figura 3.6. Surgen características especiales en la primer minibanda debido al acoplamiento entre las resonancias Fano con estados de la minibanda. El problema  $\Omega d$  abarca prácticamente la segunda minibanda para  $m = 10$ , mientras que para  $m = 20$  cubre la segunda minibanda y el gap que existe entre la primera y la segunda minibandas.

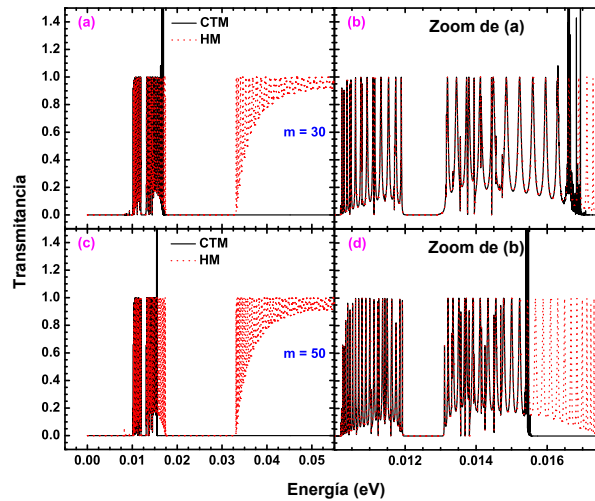


Figura 3.8: Transmitancia versus energía para una superred basada en doble capa de grafeno con un número de barreras igual a: (a)  $m = 30$  and (c)  $m = 50$ . Para  $m = 30$  el problema  $\Omega d$  afecta la transmitancia a altas energías y más del 50 % de la primer minibanda en el caso de  $m = 50$ . Nótese que la matriz híbrida resuelve el problema  $\Omega d$  y obtiene excelentes resultados de la transmitancia independientemente de la energía, ángulo de incidencia y tamaño del sistema.

## 3.2. Resonancias Fano en superredes de doble capa de grafeno

### 3.2.1. Sistema de una barrera de potencial

Después de realizar el análisis anterior y con ello seleccionado como método de cálculo, al método de la matriz de transferencia, el siguiente objetivo es descubrir el impacto de las resonancias Fano en las propiedades de transporte. En primer lugar se analizará el sistema de una barrera (BGSBs), el sistema más simple en el análisis de la propagación de electrones. Un diagrama sugerido se muestra en la Figura 3.9, la doble capa de grafeno se deposita sobre un sustrato con el cual no interactúa, el sustrato más común para ello es el  $SiO_2$ , después se colocan dos contactos metálicos que controlarán la energía de Fermi de los electrones (back gate) y el alto y ancho de la barrera (top gate), ver Figura 3.9a. Éste último causa un desplazamiento de los paraboloides de Dirac sobre el eje de la energía generando un perfil de bandas escalonado para la banda de conducción como el de la Figura 3.9b. Aunque la región dentro de la barrera no está permitida para los electrones para los huecos si lo está y para ellos es una cavidad resonante que en principio puede dar lugar a estados propagantes y discretos, el diagrama que representa tal situación se ve en la Figura 3.9c. Entonces si ajustamos el ángulo de incidencia de los electrones junto con el ancho y alto de la barrera existe cierta probabilidad de que aparezcan resonancias Fano en la transmitancia, esto significa que el perfil asimétrico de las resonancias Fano depende de los anteriores parámetros, Figura 3.9d.

La Figura 3.10 muestra la transmitancia para BGSBs. La transmitancia como función de la energía a diferentes ángulos de incidencia para BGSBs se muestra en la Figura 3.10. Hemos seleccionado los ángulos de incidencia  $1^\circ$  (línea negra sólida),  $3^\circ$  (línea roja a trazos),  $5^\circ$  (línea azul punteada) y  $15^\circ$  (línea verde de trazos y puntos), el ancho y alto de la barrera son de 10 nm y 50 meV, respectivamente. Se puede observar como las líneas asimétricas características de las resonancias Fano aparecen a bajas energías, estas líneas asimétricas son agudas y bien definidas cuando el ángulo de incidencia es muy pequeño, caso contrario a lo que sucede cuando el ángulo de

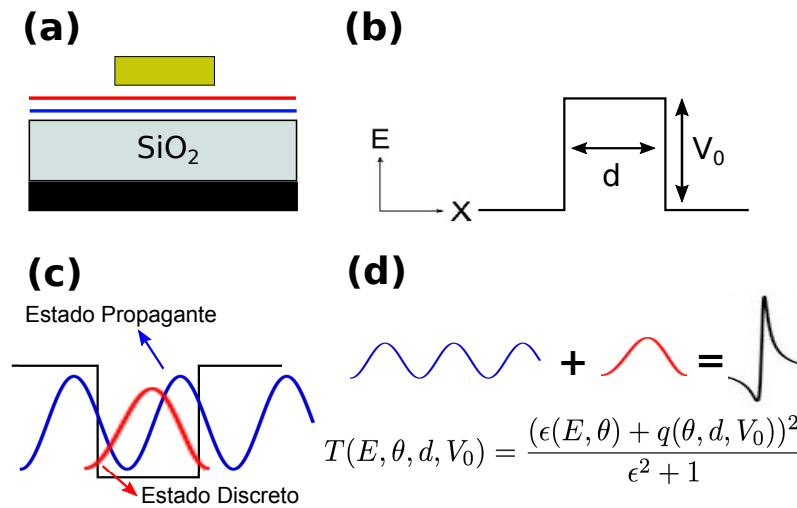


Figura 3.9: (a) Sección transversal del posible dispositivo para sistemas de una barrera en doble capa de grafeno. (b) Perfil de bandas de una barrera simple. (c) Desde una perspectiva de huecos un sistema de una barrera en doble capa de grafeno representa realmente un pozo cuántico. Además, el pozo cuántico puede contener estados discretos y de propagación como consecuencia de la cantidad de canales dentro de él. (d) Representación esquemática de la salida del acoplamiento de un estado propagante y uno discreto. En el caso del grafeno bicapa, la forma de la línea de transmisión dependerá de la energía, el ángulo de incidencia y el ancho y la altura de la barrera.

incidencia es grande donde prácticamente las resonancias Fano pierden su forma. Existe un detalle interesante, las resonancias Fano se originan en la energía  $E \approx V_0/2$  y esta localización de las resonancias Fano no se ve alterada a medida que el ángulo de incidencia crece. Esta localización en la energía es un detalle que no se puede dejar pasar porque precisamente es la energía que se toma en cuenta para tratar de ubicar su huella en las propiedades de transporte. Lo siguiente es observar como se ve afectada la resonancia Fano conforme cambia el ancho de la barrera, Figura 3.10b, para ello se han fijado el ángulo de incidencia y el alto de la barrera a  $\theta = 3^\circ$  y 50 meV, respectivamente. Se puede observar que las resonancias Fano se ven desplazadas a altas energías con los incrementos en el ancho de la barrera. También se puede ver que el perfil asimétrico de las resonancias Fano se pierde gradualmente hasta transformarse en una resonancia tipo Breit-Wigner. En el caso de 20 nm una resonancia tipo Breit-Wigner se origina a bajas energías. Un comportamiento similar ocurre con las resonancias Fano si ahora se varía el alto de la barrera de 50 meV a 100 meV, Figura 3.10c.

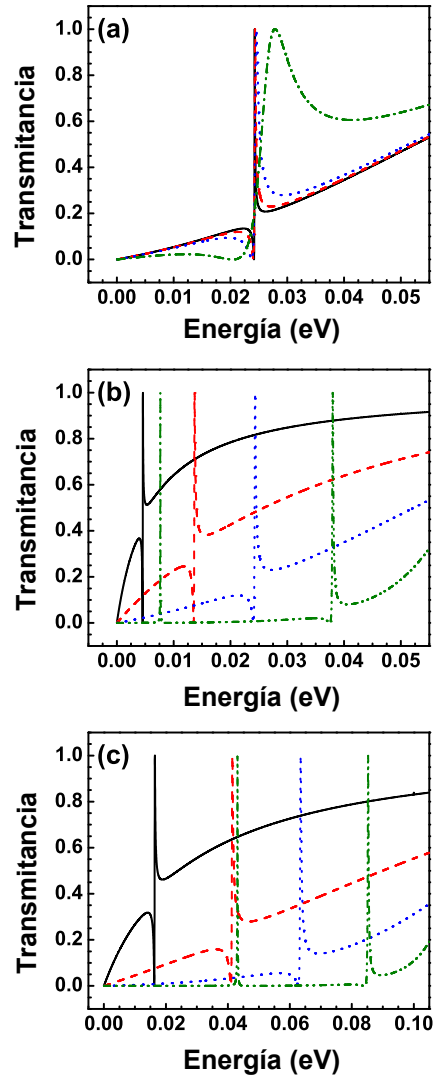


Figura 3.10: Transmitancia como función de la energía para sistemas de una barrera basados en doble capa de grafeno. (a) Resonancias Fano para varios ángulos de incidencia:  $1^\circ$  (línea negra sólida),  $3^\circ$  (línea roja a trazos),  $5^\circ$  (línea azul punteada) y  $15^\circ$  (línea verde a trazos y puntos). El ancho y la altura de la barrera permanecen fijos a 10 nm y 50 meV, respectivamente. (b) Evolución de las resonancias de Fano para diferentes anchos de barrera  $dB$ : 3 nm (línea negra sólida), 6 nm (línea roja a trazos), 10 nm (línea azul punteada) y 20 nm (línea verde a trazos y puntos). El ángulo de incidencia y la altura de barrera considerados son  $3^\circ$  y 50 mV, respectivamente. (c) Lo mismo que en (b) pero aquí  $V_0 = 100$  meV.

Un detalle interesante es el cálculo de los estados confinados, éstos pueden calcularse escribiendo el problema de valor propio de BGSB en términos de la base propia de  $\sigma_x$ ,  $\sigma_x \psi_\pm = \pm \psi_\pm$ , y aprovechando que  $\psi_\pm$  están desacoplados a incidencia normal. De hecho,  $\psi_-$  la componente que

Tabla 3.1: Comparación de las energías de los estados confinados obtenidos por el método presentado en el Apéndice B y las energías de las resonancias Fano encontradas en los espectros de transmisión de BGSBs. Se ha definido la razón entre el ancho y alto de barrera  $\eta = dB/V_0$  como un parámetro que caracteriza a la barrera. Las energías están dadas en meV y los anchos de barreras en nm.

	$\eta = \frac{3}{50}$	$\eta = \frac{6}{50}$	$\eta = \frac{10}{50}$	$\eta = \frac{20}{50}$	$\eta = \frac{3}{100}$	$\eta = \frac{6}{100}$	$\eta = \frac{10}{100}$	$\eta = \frac{20}{100}$
$E_{b1}$	0.52	7	26	46	4	37	78	98
$E_{FR}$	4	14	24	38	16	41	63	85

representa los estados confinados dentro de la barrera. A pesar de que los estados confinados se calculan con una incidencia normal, en algunos casos existe un buen acuerdo con respecto a la ubicación de la energía de las resonancias de Fano; consulte la Tabla 3.1 para una comparación explícita. Aquí, también es importante señalar que una vez que la condición de incidencia normal se relaja, la mezcla entre  $\psi_{\pm}$  da lugar a resonancias Fano en la transmitancia. En realidad, estas resonancias son bastante estrechas cerca de la incidencia normal porque su ancho es proporcional a  $q_y$ . Además, para barreras estrechas, estados con un confinamiento más débil, parece que la mezcla es más fuerte a tal punto que no hay correspondencia entre la energía de estados confinados y la ubicación en la energía de las resonancias de Fano.

Luego de encontrar como es que las resonancias Fano pueden ser moduladas con la variación del ángulo de incidencia, el ancho y alto de la barrera, es necesario ver como es que se manifiestan en las propiedades de transporte. En la Figure 3.11 se muestra la conductancia en el régimen lineal como función de la energía de Fermi para (a)  $V_0 = 50$  meV y (b)  $V_0 = 100$  meV. Los anchos de barrera son los mismos que en la Figura 3.10, esto es, 3 nm (línea negra sólida), 6nm (línea roja a trazos), 10 nm (línea azul punteada) y 20 nm (línea verde de trazos y puntos). Se puede observar que en ambos casos,  $V_0 = 50$  meV y  $V_0 = 100$ , el comportamiento de las curvas de conductancia es muy similar en términos generales. Para la barrera más angosta (3 nm), la conductancia es prácticamente cero hasta una energía de 5 meV para  $V_0 = 50$  meV y hasta 15 en el caso de  $V_0 = 100$  meV. Luego a estas energías la conductancia presenta un aumento repentino, que se ha resaltado con las rayas



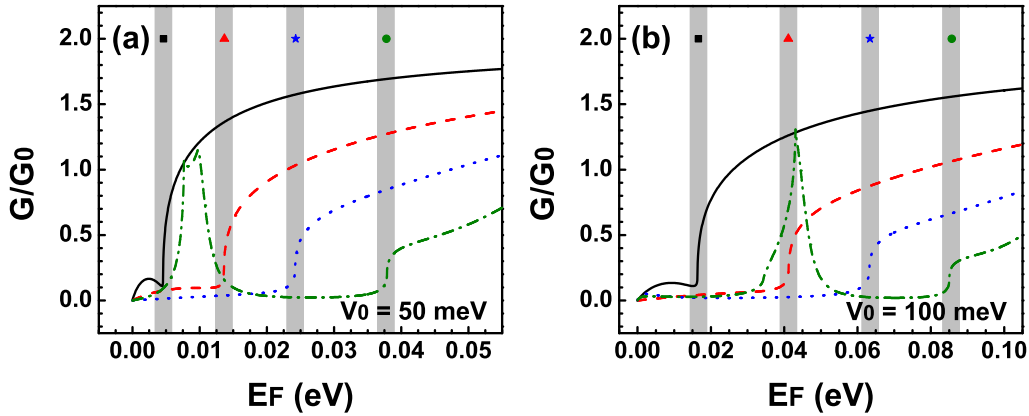


Figura 3.11: Conductancia como función de la energía de Fermi para sistemas de una barrera basados en doble capa de grafeno. (a) Conductancia para varios anchos de la barrera  $dB$ : 3 nm (línea negra sólida), 6 nm (línea roja a trazos), 10 nm (línea azul punteada) y 20 nm (línea verde a trazos y puntos). La altura de la barrera en todos los casos es de 50 meV. (b) Lo mismo que en (a) pero aquí  $V_0 = 100$  meV. Las rayas verticales sombreadas resaltan la ubicación de las resonancias Fano.

verticales sombreadas. Este aumento repentino no se ve afectado a pesar del aumento del ancho de las barreras, solo presenta desplazamiento a energías más altas. Comparando con la transmitancia estas energías son precisamente las energías en las que aparecen las resonancias Fano. También se puede observar para el caso de 20 nm que el pico que aparece en las curvas de conductancia está directamente relacionado con las resonancias Breit-Wigner que aparecen en la transmitancia en las Figuras 3.10b y 3.10c. Por lo tanto, se logró identificar la región energética en que las resonancias Fano contribuyen a las propiedades de transporte, y esto puede servir como huella distintiva de la existencia de este fenómeno exótico en la doble capa de grafeno y que pueda ser demostrado experimentalmente.

Actualmente existen ciertos avances en técnicas experimentales para discriminar la contribución angular de los electrones en las propiedades de transporte en dispositivos que utilizan el sistema de una sola barrera. Considerando lo anterior, se propuso como tarea calcular la conductancia en el rango angular al cual las resonancias Fano son preponderantes. En la Figura 3.12 se muestran los resultados para la conductancia como función de la energía de Fermi en el intervalo angular

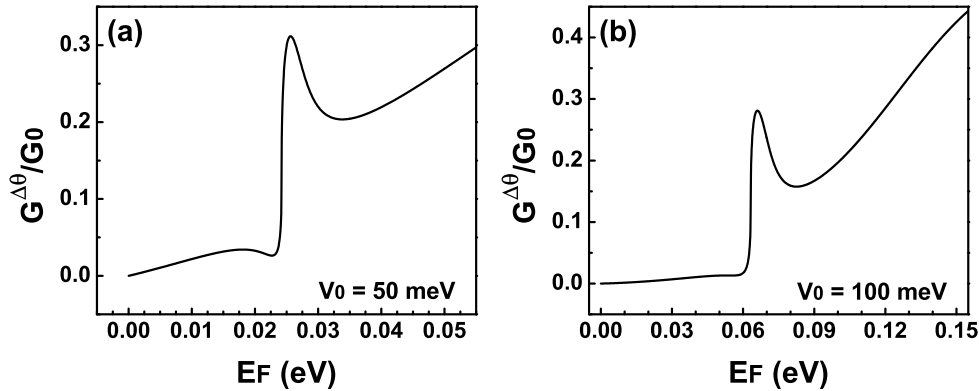


Figura 3.12: Conductancia como función de la energía de Fermi para BGSBs en el intervalo angular  $(-\pi/12, \pi/12)$  en el cual las resonancias Fano son preponderantes. Los altos de barrera considerados son (a) 50 meV and (b) 100 meV. El ancho de barrera es de 10 nm en ambos casos.

$(-\pi/12, \pi/12)$ , en este intervalo las resonancias Fano son relevantes. Las Figuras 3.12a y 3.12a corresponden a  $V_0 = 50$  meV y  $V_0 = 100$  meV, respectivamente. Solo se ha considerado un ancho de 10 nm en ambos casos. Se puede observar que reduciendo el intervalo angular las curvas de conductancia presentan un perfil asimétrico similar al de las resonancias Fano en la transmitancia y precisamente en las energías donde éstas se presentan. Por lo tanto, estos perfiles asimétricos en las curvas de conductancia están directamente relacionados con las resonancias Fano en la transmitancia y existe la posibilidad de que mediante mediciones angulares de transporte las resonancias Fano puedan ser demostradas en doble capa de grafeno.

### 3.2.2. Sistema de dos barreras de potencial

El siguiente sistema a analizar es el sistema de dos barreras basado en doble capa de grafeno (BGDBs). Este caso será más interesante porque la región de pozo puede incorporar sus propios estados propagantes y evanescentes-divergentes que enriquecerán las características de la transmitancia. La Figura 3.13 muestra los resultados BGDBs. La evolución de la transmitancia con el ángulo de incidencia se presenta en la Figura 3.13a, donde  $V_0 = 50$  meV y los anchos de barreras y pozo son  $dB = dW = 10$  nm. Se han considerado barreras simétricas. Se puede observar que

las resonancias Fano se presentan a una energía de 20 meV, a diferencia del caso SBGBs éstas presentan un pequeño desplazamiento hacia el rojo. Y de igual manera la forma asimétrica de las resonancias Fano sólo se presenta a pequeños ángulos. Debido a la región de pozo han surgido un par de características, la primera es la aparición de una resonancia Breit-Wigner a bajas energías, en 2.5 meV y que no se ve afectada por la variación del ángulo de incidencia, y la segunda es que a altas energías, aproximadamente después de los 40 meV, aparece una resonancia extendida que se amplía a medida que el ángulo de incidencia crece, véase la línea verde a trozos y puntos.

El hecho de que exista un pozo entre las barreras puede dar lugar a nuevas características de resonancia. Y quizás estas nuevas características puedan cambiar las curvas de conductancia y dar lugar a características especiales en tales curvas y servir como huellas significativas de las resonancias Fano. Si se fija el ángulo de incidencia y el alto de barrera a  $3^\circ$  y  $V_0 = 50$  meV, respectivamente, se podrán observar nuevas características si se modula el ancho de las barreras y el pozo, Figura 3.13b. Por ejemplo, en el caso de  $dB = dW = 3$  nm, se puede ver un espectro típico de BGSBs con una resonancia Fano alrededor de 10 meV. En este caso, el pozo es tan estrecho que sus características no se manifiestan en lo absoluto en la transmitancia. Al aumentar los anchos a 6 nm, aparecen las resonancias que surgen a bajas y altas energías como en la Figura 3.13a, además existe un desplazamiento al azul respecto de las resonancias del caso de 3 nm. Hasta donde hemos corroborado las resonancias Fano provienen de la región de barrera y las resonancias de baja y alta energía provienen principalmente del pozo. Luego, un aumento significativo en los anchos de barreras y pozo hace que las resonancias se aproximen y que exista alguna interacción entre ellas generando nuevos perfiles de resonancia. En el caso de 9 nm la resonancia a alta energía es bastante estrecha, pero no lo suficiente como para interactuar con la resonancia Fano, sin embargo para 10 nm, las resonancias se han fusionado para dar lugar a un nuevo perfil de resonancia, aproximadamente a 27 meV, este perfil es muy similar a resonancias que se conocen en óptica como resonancias híbridas. La Figura 3.13c muestra la transmitancia para  $V_0 = 100$  meV, el principal cambio con respecto a  $V_0 = 50$  meV son los desplazamientos al azul de los espectros de transmisión, y el hecho de que la resonancia híbrida surge en anchos más estrechos (7 nm). También se observa que la

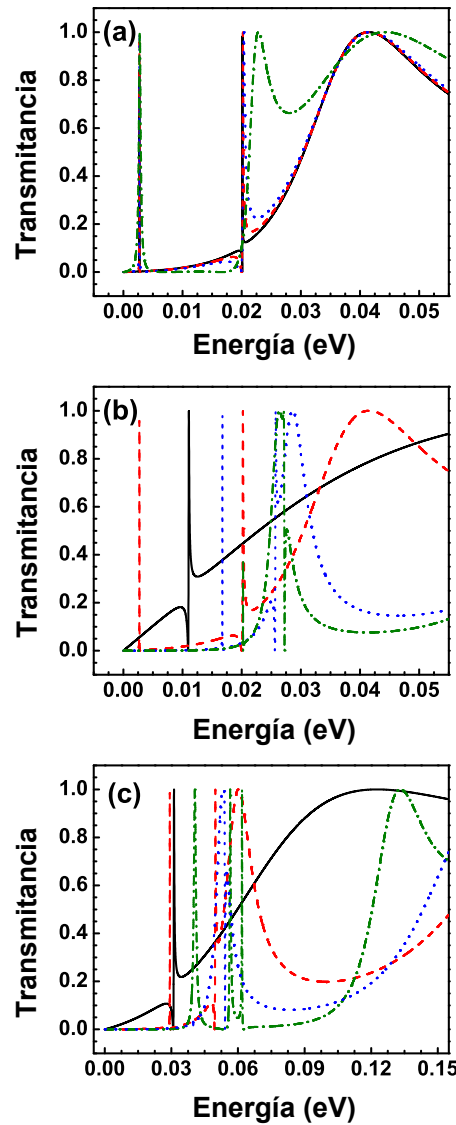


Figura 3.13: Transmitancia como función de la energía BGDBs. (a) Transmitancia para varios ángulos de incidencia:  $1^\circ$  (línea negra sólida),  $3^\circ$  (línea roja a trazos),  $5^\circ$  (línea azul punteada) y  $15^\circ$  (línea verde a trazos y puntos). El ancho de las barreras y el pozos y la altura de la barrera permanecen fijos a  $dB = dW = 10$  nm y  $V_0 = 50$  meV, respectivamente. (b) Evolución de la transmitancia para diferentes anchos de barreras y pozo  $dB = dW$ : 3 nm (línea negra sólida), 6 nm (línea roja a trazos), 9 nm (línea azul punteada) y 10 nm (línea verde a trazos y puntos). El ángulo de incidencia y la altura de barrera considerados son  $3^\circ$  y 50 mV, respectivamente. (c) Lo mismo que en (b) pero los anchos considerados son 3 nm (línea negra sólida), 6 nm (línea roja a trazos), 7 nm (línea azul punteada) y 9 nm (línea verde a trazos y puntos). Además  $V_0 = 100$  meV.

resonancia híbrida se divide en dos resonancias Breit-Wigner débilmente acopladas, como en el caso de 9 nm (línea verde de trozos y puntos). Por lo tanto, al igual que las resonancias Fano, las

resonancias híbridas están bien definidas a pequeños ángulos de incidencia y se deforman a medida que crece el ángulo, esto se puede ver en la Figura 3.14. De la misma manera que BGSBs, esto abre la posibilidad de estudiar las propiedades de transporte en el rango angular en que las resonancias híbridas son preponderantes así como la oportunidad de probar su existencia mediante mediciones de transporte angular.

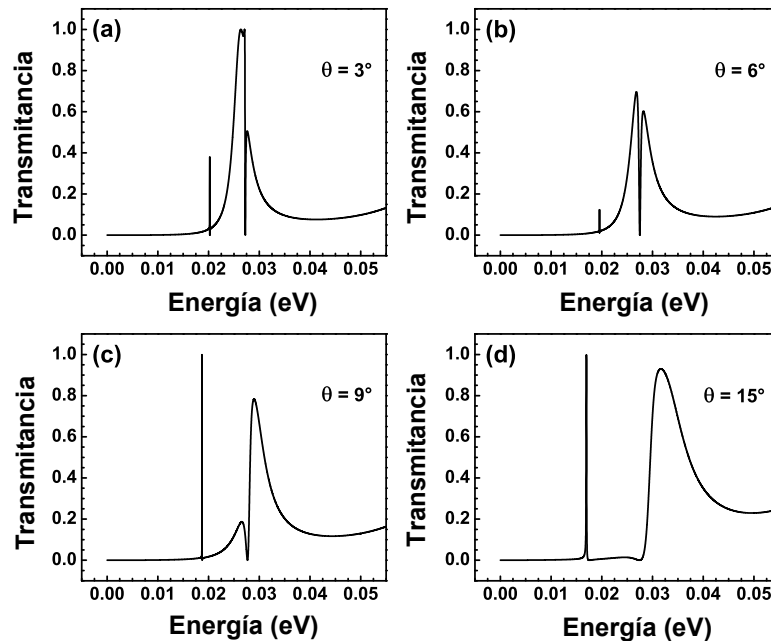


Figura 3.14: Evolución de las resonancias Fano híbridas para diferentes ángulos de incidencia: (a)  $3^\circ$ , (b)  $6^\circ$ , (c)  $9^\circ$  y (d)  $15^\circ$ . El ancho y la altura de las barreras son 10 nm y 50 meV, respectivamente. Como en el caso de las resonancias de Fano, la forma de línea híbrida es: bien definida en ángulos pequeños; se deforma y eventualmente se pierde a medida que aumenta el ángulo.

Solo queda estudiar las propiedades de transporte para BGDBs. En la figura 3.15 se muestran las curvas de conductancia como función de la energía de Fermi para (a)  $V_0 = 50$  meV y (b)  $V_0 = 100$  meV. Los anchos de las barreras y el pozo en las Figuras 3.15a y 3.15b son los mismos que los de las Figuras 3.13b y 3.13c. En los casos en que los anchos son pequeños la conductancia es prácticamente la misma que en BGSBs, sin embargo para los casos de 10 nm (línea verde a trozos y puntos en la Figura 3.15a) y 7 nm (línea azul punteada en la Figura 3.15b), la conductancia presenta algunas características que contrastan con los otros casos, como lo es el pico y el mínimo

alrededor de 27 meV y 55 meV, respectivamente. Estas formas en las curvas de conductancia se deben a las resonancias híbridas porque su localización energética coincide con con la ubicación de las resonancias híbridas en la transmitancia.

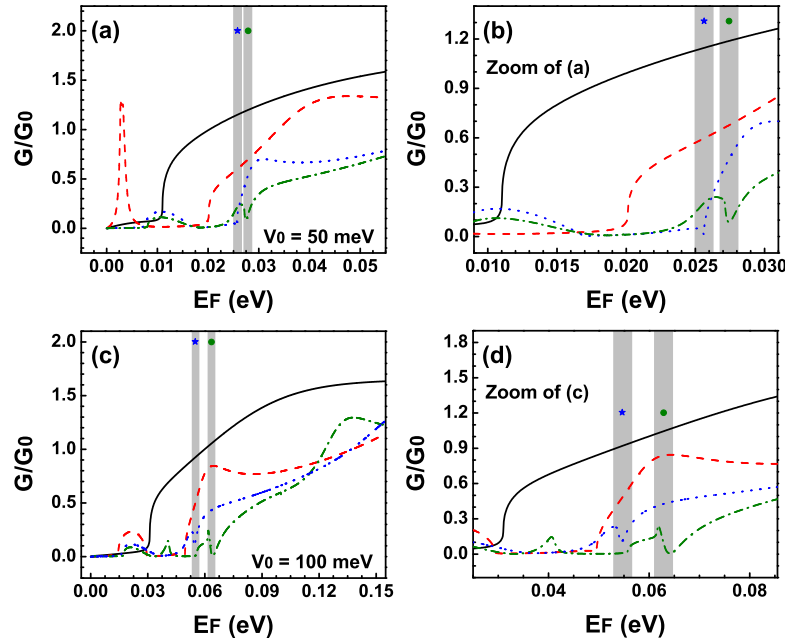


Figura 3.15: Conductancia como función de la energía de Fermi para BGDBs. (a) Conductancia para varios anchos de barreras y pozo  $dB = dW$ . Los anchos y las alturas corresponden a los utilizados en la figura 3.13b. (c) Similar a (a) pero los parámetros usados son los que corresponden a la figura 3.13c. (b,d) Representan los zooms para (a,c). Estas figuras tienen la intención de magnificar la región en la que las resonancias híbridas son preponderantes y aún más importante, cómo estas resonancias definen el perfil de las curvas de conductancia. Las rayas verticales sombreadas resaltan la ubicación de las resonancias Fano y las resonancias Fano híbridas.

También se puede observar que en el caso de 9 nm (línea verde a trozos y puntos) en la Figura 3.15b, la región con un pico mínimo es más pronunciada y su localización concuerda bastante bien con el acople débil entre las resonancias Breit-Wigner de la transmitancia (línea verde punteada) de la Figura 3.13c. Por lo tanto, en el caso de BGDBs, se encontraron nuevas características como el pico-mínimo y que están directamente relacionadas con las resonancias híbridas y, en principio, pueden servir como huella distintiva de su existencia y de la existencia de las resonancias Fano. Por último, en la Figura 3.16 se muestra la conductancia como función de la energía de Fermi

reduciendo el rango angular a  $(-\pi/12, \pi/12)$  y como era de esperarse, tal como en el caso de BGSBs, se obtiene la forma de línea híbrida. La elección de este rango es porque precisamente en esa región es donde las resonancias híbridas son preponderantes, además esta región es totalmente identificable y en principio puede ser detectable a través de mediciones de transporte angular.

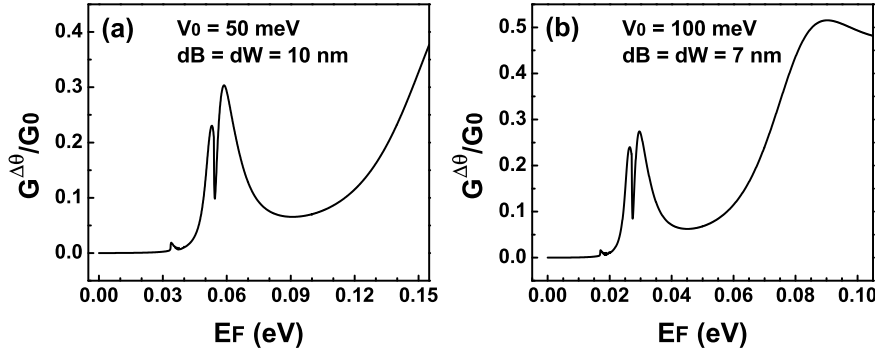


Figura 3.16: Conductancia como función de la energía de Fermi para BGDBs en el intervalo angular  $(-\pi/12, \pi/12)$  en el cual las resonancias Fano son preponderantes. Los altos de barrera considerados son (a) 50 meV (10 nm) and (b) 100 meV (7 nm).

### 3.2.3. Superred periódica

Después de haber analizado los casos BGSBs y BGDBs se procedió a analizar el caso más general, superredes basadas en doble capa de grafeno (BGSs). Este caso se vuelve interesante debido a la formación de minibandas, y más aún porque las minibandas en BGSs dependen fuertemente del ángulo de incidencia, cosa que no ocurre con las minibandas en superredes de semiconductores convencionales. En las dos subsecciones anteriores se ha determinado que en sistemas de una y dos barreras las resonancias Fano son una característica intrínseca de la doble capa y que su forma asimétrica también depende del ángulo de incidencia. Eso significa que en BGSs las minibandas y las resonancias Fano aunque son fenómenos que van a ocurrir a diferentes energías, podemos modularlas ajustando los parámetros fundamentales de la superred para llevarlas a la misma región de energía, la Figura 3.17a,b muestra un diagrama esquemático de éstas posibilidades, mientras que la Figura 3.17c muestra el posible resultado su interacción.

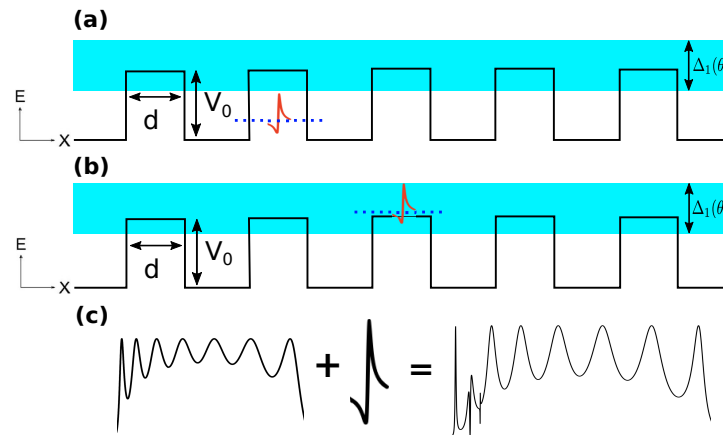


Figura 3.17: Representación esquemática de los posibles escenarios entre resonancias Fano y los estados de la minibanda. (a) La resonancia Fano (línea azul punteada) y la minibanda (región cian sombreada) se encuentran en diferentes regiones de energía, de modo que no hay acoplamiento entre ellas. (b) La resonancia Fano y la minibanda se encuentran en la misma región de energía y su acoplamiento puede tener lugar. (c) El acoplamiento de una resonancia Fano y los estados de minibanda dan lugar a nuevas características en el espectro de transmisión.

Los resultados se muestran en la Figura 3.18, la superred es de 9 períodos y la forman barreras y pozos simétricos. Los anchos de las barreras y pozos son  $dB = dW =$  (a) 3 nm, (b) 5 nm y (c) 7nm. Los parámetros fijos son  $\theta = 3^\circ$  y  $V_0 = 50$  meV. Analizando el primer ancho se puede observar que la resonancia Fano y la minibanda se encuentran en diferentes regiones de energía, entre ellas no existe acoplamiento ni alguna nueva característica en la transmitancia. La resonancia Fano se encuentra en 23 meV y la minibanda comienza en 28 meV y presenta un ancho de energía igual a 222 meV. Sin embargo si se aumenta a 5 nm, la resonancia Fano y la minibanda coinciden en la misma región de energía, y su interacción se da al comienzo de la minibanda, formando el perfil que distingue a una resonancia híbrida. También se observa que el ancho de la minibanda disminuye alrededor de 132 meV y que se desplaza hacia el rojo, mientras que la resonancia Fano se ha desplazado hacia el azul. Si se aumenta el ancho a 7 nm, nuevamente ocurre una disminución en el ancho de la minibanda de aproximadamente 53 meV, así como desplazamientos al azul y al rojo de la resonancia Fano y la minibanda. Esto significa que la resonancia Fano tiende a localizarse a energías más altas pero siempre dentro de la minibanda. El acoplamiento entre la resonancia Fano y la minibanda da lugar a la aparición de nuevos perfiles de resonancias en la transmitancia.



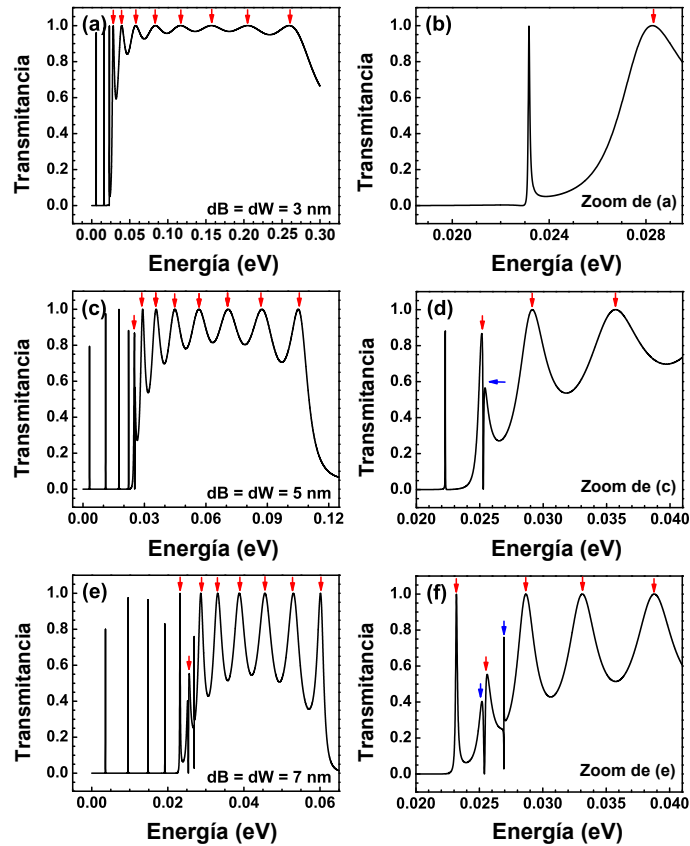


Figura 3.18: Transmitancia de BGSs para diferentes anchos de barreras y pozos  $dB = dW$ : (a) 3 nm, (c) 5 nm y (e) 7 nm. En todos estos casos, la altura de las barreras, el ángulo de incidencia y el período de la superred se establecieron en 50 meV,  $3^\circ$  y 9, respectivamente. Para tener una mejor vista de la resonancia Fano y su acoplamiento con la minibanda, se muestran los zooms de los espectros de transmisión considerados. Específicamente, (b,d,f) representan los zooms de (a,c,e), respectivamente.

Del mismo modo en que se logró identificar a las resonancias Fano e híbridas en las curvas de conductancia para BGSBs y BGDBs, en el caso de BGSs también lo logramos. Por ejemplo, cuando la resonancia Fano y la minibanda están desacopladas, Figura 3.19a, la conductancia muestra el típico salto repentino relacionado con las resonancias Fano, a 23 meV, y un pico ancho con pequeñas oscilaciones que muestran la contribución de la minibanda. Estas oscilaciones se muestran con flechas verticales rojas. También podemos ver picos a bajas energías que están asociados a las resonancias Breit-Wigner. Cuando la resonancia Fano y la minibanda se acoplan al inicio de esta última, Figura 3.19b, la conductancia presenta una característica distintiva al

inicio del pico ancho que proviene de la minibanda, véase la flecha vertical azul. De hecho, esta característica distintiva es un pequeño pico con una forma de línea que contrasta con las líneas de formas típicas asociadas a los estados de la minibanda. Una mayor penetración de la resonancia Fano en la minibanda que podemos ver en la Figura 3.19d, da lugar a una peculiar forma de línea en la conductancia. Específicamente, se puede observar una pequeña muesca, resaltada por flechas azules y la franja vertical sombreada, a aproximadamente 25 meV.

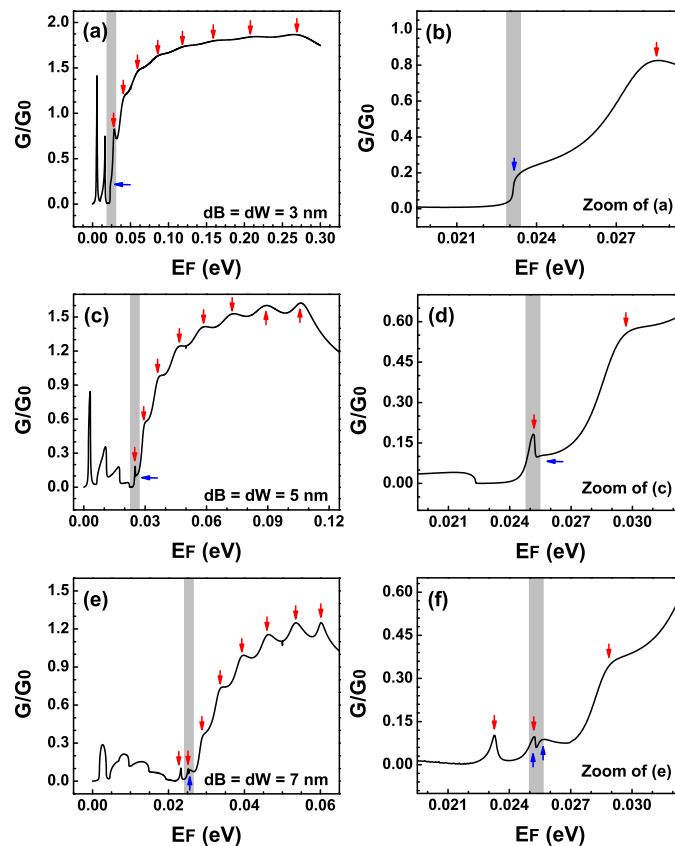


Figura 3.19: Conductancia de BGS para diferentes anchos de barreras y pozos  $dB = dW$ : (a) 3 nm, (c) 5 nm y (e) 7 nm. Para tener una mejor perspectiva de las huellas en las curvas conductancia de la contribución de las resonancias de Fano y su acoplamiento con los estados de minibanda, el rango de energía se ha reducido a la región de energía en la que el acoplamiento es preponderante. Los otros parámetros importantes de la superred son los mismos que en la Figura 3.18. Las rayas verticales sombreadas resaltan la región de energía en la que se produce el acoplamiento.

Vale la pena mencionar que la ubicación de esta muesca concuerda bien con la localización de las nuevas características del espectro de transmisión de la Figura 3.18c. Aquí, también es importante

señalar que a pesar de que el transporte está prácticamente dominado por la minibanda y las resonancias de Breit-Wigner, aún es posible identificar y caracterizar la contribución de las nuevas características espectrales. Además, al reducir el rango angular de la conductancia, es posible discriminar de una manera más transparente y directa la contribución del acoplamiento de la resonancia Fano y los estados de la minibanda. En la Figura 3.20 se muestran los resultados para la reducción angular de las curvas de conductancia presentadas en la Figura 3.19d,f. En este caso, el rango angular se redujo a  $(-\pi/18, \pi/18)$ . Como en el caso de las barreras simples y dobles, la reducción angular modifica en gran medida las curvas de conductancia hasta tal punto que las nuevas curvas de conductancia se asemejan en gran medida a las curvas correspondientes de los espectros de transmisión.

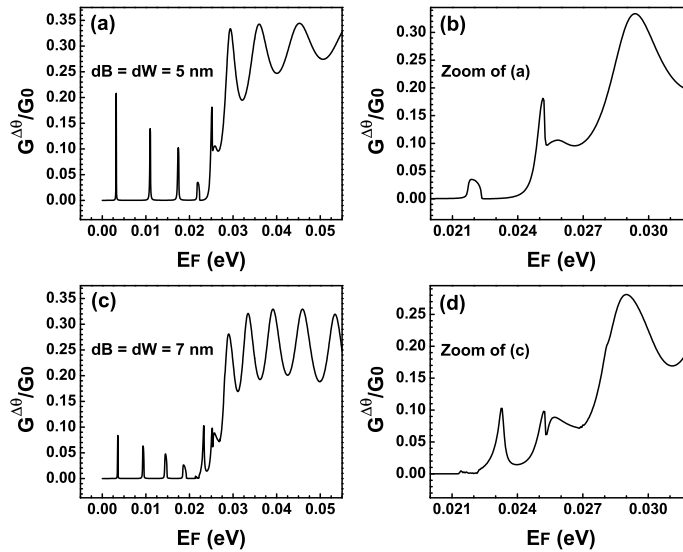


Figura 3.20: Conductancia de BGS para el intervalo angular en el cual el acoplamiento entre las resonancias de Fano y la minibanda es dominante. En este caso, el intervalo angular se ha reducido con respecto a los casos de barreras simples y dobles. En particular, el rango angular considerado es  $(-\pi/18, \pi/18)$ . (a) y (c) Corresponden a los anchos de las figuras 3.19c y 3.19e, respectivamente. Los otros parámetros estructurales de la superred son los mismos que en las figuras anteriores, Figuras. 3.18 y 3.19. (b,d) Representan los zooms de (a,c), respectivamente.

### 3.3. El efecto de la noparabolicidad y la apertura de band-gap

El último aspecto que consideraremos es el asociado a efectos como la noparabolicidad y la apertura de bandgap. La noparabolicidad es relevante a energías de 390 meV y la apertura de bandgap se da cuando ambas láminas se encuentran a potenciales distintos, en efecto la energía de apertura estará dada por  $E_g = V_1 - V_2$ .

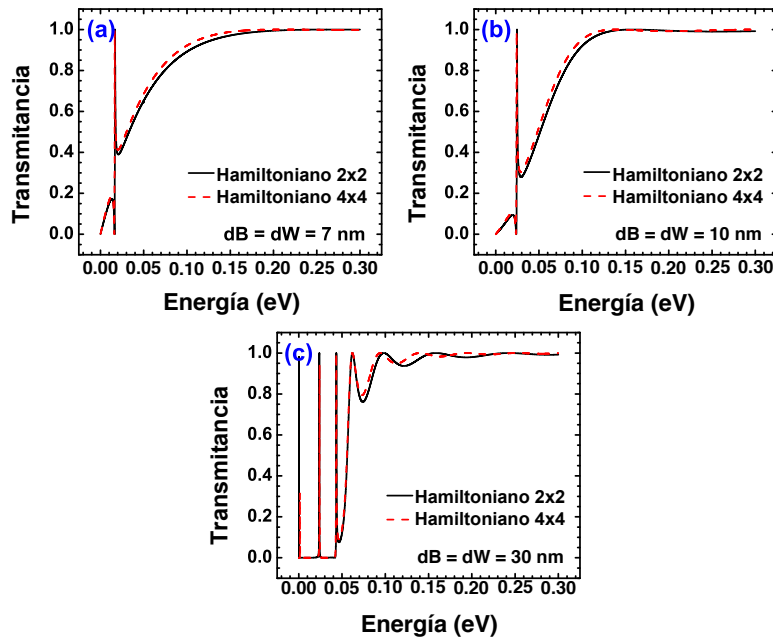


Figura 3.21: Comparación de espectros de transmisión de los Hamiltonianos a dos y cuatro bandas para BGSBs. Los gráficos muestran la Transmitancia como función de la energía para varios anchos de barrera. El ángulo de incidencia y el alto de barrera son  $3^\circ$  y  $V_0 = 50\text{meV}$ , respectivamente. Los anchos de barrera son  $dB$ : (a) 3 nm, (b) 7nm y (c) 10 nm.

#### 3.3.1. Efecto de la noparabolicidad

Antes de analizar a detalle el efecto de la noparabolicidad, se hizo una comparación entre los Hamiltonianos a dos y cuatro bandas, esto con la finalidad de observar si hay diferencias significativas cuando se usa uno u otro. La Figura 3.21 muestra la transmitancia como función

de la energía para BGDBs, los parámetros fijos son  $\theta = 3^\circ$  y  $V_0 = 50$  meV, el análisis se realizó para tres anchos de barrera  $dB =$  (a) 7 nm, (b) 10 nm y (c) 30 nm. Como se puede observar los resultados para el Hamiltoniano a cuatro bandas (línea roja a trozos) son prácticamente los mismos que para el Hamiltoniano a dos bandas (línea negra sólida), en el caso de 30 nm a partir de la energía 100 meV existe un ligero desfase entre espectros, sin embargo esto no afecta la región donde se originan las resonancias Fano.

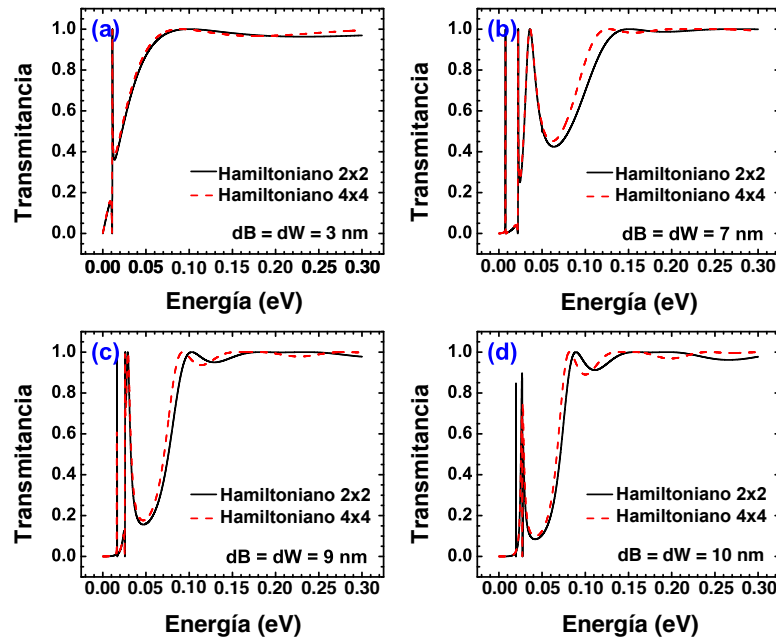


Figura 3.22: Comparación de espectros de transmisión de los Hamiltonianos a dos y cuatro bandas para BGDBs. Los gráficos muestran la Transmitancia como función de la energía para varios anchos de barrera. El ángulo de incidencia y el alto de barrera son  $3^\circ$  y  $V_0 = 50$  meV, respectivamente. Los anchos de barrera son  $dB$ : (a) 3 nm, (b) 7 nm, (c) 9 nm y (d) 10 nm.

La Figura 3.22 muestra la transmitancia como función de la energía para BGDBs, los parámetros fijos son similares a los de la Figura 3.21, las barreras son simétricas, los anchos que elegimos son  $dB = dW =$  (a) 3 nm, (b) 7 nm, (c) 9 nm y (10) 10 nm, esto se hizo con la finalidad de observar la evolución de las resonancias Fano al interactuar con la resonancia que aparece a altas energías. Se puede observar que prácticamente en todos los casos existe un desfase en los espectros de transmisión a partir de los anchos de 7 nm, este desfase ocurre después del valor  $E \approx 50$

meV, sin embargo al igual que el caso para BGSBs, esto no afecta la región donde las resonancias Fano o bien las resonancias híbridas son preponderantes.

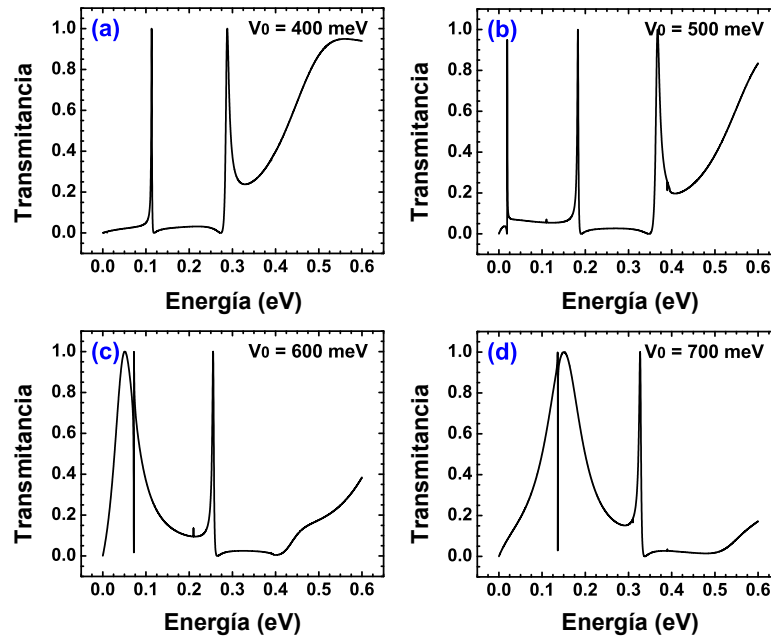


Figura 3.23: Evolución de las resonancias Fano para BGSBs. Los gráficos muestran la Transmitancia como función de la energía para varios altos de barrera. El ángulo de incidencia y el ancho de barrera son  $3^\circ$  y  $dB = 7nm$ , respectivamente. Los altos de barrera son  $V_0$ : (a) 400 meV, (b) 500 meV, (c) 600 meV y (d) 700 meV.

En la sección anterior se demostró que modulando los parámetros del sistema es posible desplazar las resonancias Fano a altas energías, entonces para observar si la noparabolicidad afecta o no a las resonancias Fano es necesario modular los parámetros principales del sistema para que las resonancias Fano se desplacen hasta una energía de 390 meV donde surge el efecto de la noparabolicidad. En la Figura 3.23 se muestra la transmitancia como función de la energía para BGSBs a diferentes altos de barrera, se tomaron los valores (a)  $V_0 = 400$  meV, (b)  $V_0 = 500$  meV, (c)  $V_0 = 600$  meV y (d)  $V_0 = 700$  meV, se fijaron el ángulo de incidencia y el ancho de la barrera a  $3^\circ$  y 7 nm, respectivamente. Para  $V_0 = 400$  meV, se observa una resonancia Fano en  $E = 0.3$  eV, al incrementar el alto de la barrera a 500 meV, la resonancia Fano se ha desplazado a una energía de aproximadamente 0.35 eV, hasta aquí la resonancia Fano aún no se ve afectada por

la noparabolicidad, pero cuando se incrementa nuevamente el alto de la barrera a 600 meV, se espera encontrar a la resonancia Fano alrededor de 0.40 eV, pero ya no aparece tal resonancia, ésta ha desaparecido del espectro de transmisión, esto ya es más evidente para el caso de  $V_0 = 700$  meV. Esto significa que el efecto de la noparabolicidad está presente y afecta drásticamente a las resonancias Fano a tal grado de desaparecerlas.

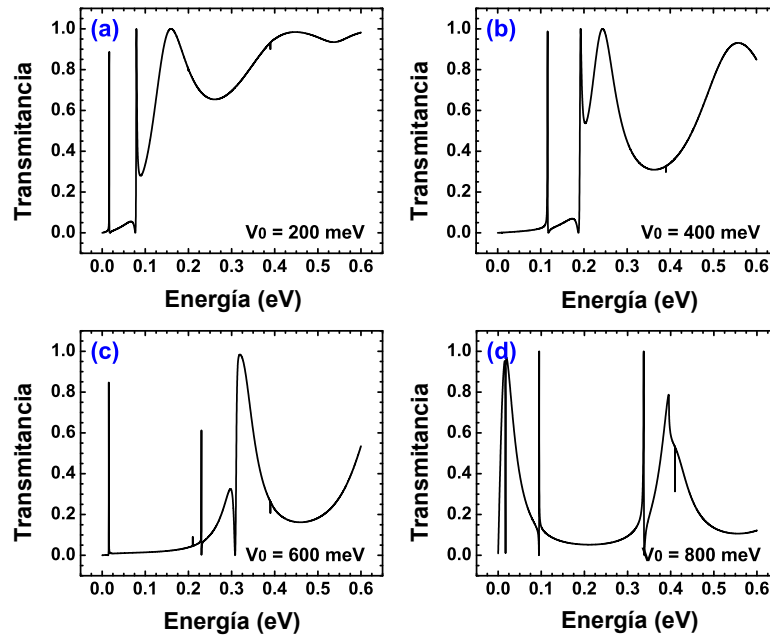


Figura 3.24: Evolución de las resonancias Fano para BGDBs. Los gráficos muestran la Transmisión como función de la energía para varios altos de barrera. El ángulo de incidencia y el ancho de barrera son  $3^\circ$  y  $dB = 7nm$ , respectivamente. Los altos de barrera son  $V_0$ : (a) 200 meV, (b) 400 meV, (c) 600 meV y (d) 800 meV.

El caso de BGDBs se muestra en la Figura 3.24, los parámetros fijos son  $\theta = 3^\circ$  para el ángulo de incidencia y para los anchos de barreras y pozos  $dB = dW = 7$  nm, los altos de barrera utilizados son: (a)  $V_0 = 200$  meV, (b)  $V_0 = 400$  meV, (c)  $V_0 = 600$  meV y (d)  $V_0 = 800$  meV. Al igual que en el caso de BGSBs, para altos menores a 600 meV, las resonancias Fano conserva su perfil asimétrico, el único detalle es que la resonancia Fano se corre hacia el azul mientras que la resonancias a alta energía se corre hacia el rojo, para cuando el alto de las barreras es de 600 meV existe un interacción entre la resonancia Fano y la resonancia alta energía formando una resonancia

híbrida tal como ocurrió con este mismo sistema en la sección anterior. Sin embargo nuevamente al incrementar el alto de las barreras a  $V_0 = 800$  meV el perfil de la resonancia híbrida también se ve afectado por la noparabolicidad. La resonancia híbrida debería de encontrarse en 0.4 eV pero en lugar de ella se puede observar una deformación, que se puede apreciar como una inestabilidad numérica en la transmitancia.

### 3.3.2. Efecto de la apertura del bandgap

La apertura del bandgap en la física del estado sólido juega un papel muy importante a la hora de crear dispositivos nanoelectrónicos mediante sistemas multibarreras basados en semiconductores convencionales. La doble capa de grafeno a diferencia de la monocapa puede tener un bandgap si se le aplica un campo eléctrico externo o bien si las láminas que la forman se encuentra a diferentes potenciales electrostáticos. Si se considera el hecho de que las resonancias Fano son un fenómeno exótico de la doble capa de grafeno que pueden ser explotadas tecnológicamente y si se logra demostrar que las resonancias Fano siguen presentes aún cuando exista un bandgap, la doble capa de grafeno impactaría mucho en la nanotecnología.

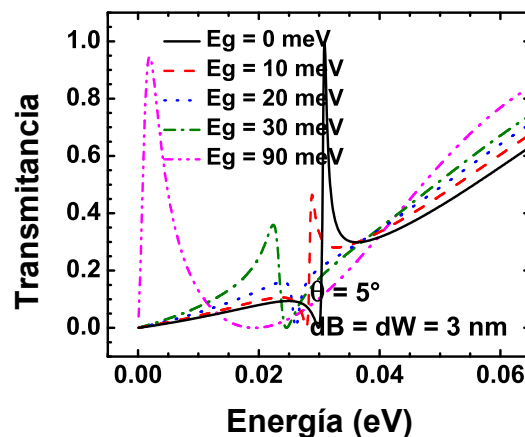


Figura 3.25: Evolución de las resonancias Fano para varios bandgaps en BGSBs. Como se puede observar, a medida que aumenta el bandgap, la resonancia Fano se corre al rojo. Además, el perfil Fano prácticamente se pierde después de un bandgap de 30 meV. El bandgap se define como  $E_g = V_1 - V_2$ . En este caso,  $V_2$  varía, mientras que  $V_1$  permanece fijo a 100 meV.



El siguiente paso en la investigación de las resonancias Fano en sistemas multibarreras basados en doble capa de grafeno es precisamente eso, analizar si las resonancias Fano se ven afectadas por la apertura del bandgap. La Figura 3.25 muestra la transmitancia como función de la energía para BGSBs a diferentes valores de bandgap, el ángulo de incidencia es de  $\theta = 5^\circ$  y el ancho de la barrera es de  $dB = 7$  nm, estos parámetros permiten obtener un buen perfil asimétrico de una resonancia Fano, para la apertura del bandgap se fijó el valor de  $V_1 = 100$  meV y se tomaron diferentes valores de  $V_2$ . Cuando no existe bandgap, la resonancia Fano se encuentra alrededor de 45 meV (línea negra sólida), pero al incrementar el valor del bandgap a 10 meV (línea roja a trozos) la resonancia Fano se desplazó hacia el rojo, su perfil asimétrico no desaparece pero su tamaño si, se hace más pequeña. Si el bandgap se vuelve a incrementar 10 meV (línea azul punteada) la resonancia tiene un desplazamiento extra pero su perfil pasa de ser asimétrico a tener el perfil de una antiresonancia pero oblicua. Para cuando el bandgap es de 30 meV (línea verde a trozos y puntos) el perfil de la resonancia vuelve a sufrir un desplazamiento extra hacia el rojo pero nuevamente su perfil es asimétrico pero invertido, esto lleva a concluir que la apertura del bandgap esta directamente relacionada con el parámetro fenomenológico  $q$  que da la forma del perfil de resonancia en la fórmula de Fano. Si se toman valores muy altos en la apertura del bandgap la resonancia Fano prácticamente desaparece (línea magenta).

El caso de BGDBs se muestra en la Figura 3.26, todos los parámetros son los mismos que en la Figura 3.25, la única diferencia son los anchos pues están dados por el valor  $dB = dW = 3$  nm. Los resultados son de manera general prácticamente los mismos a los obtenidos para BGSBs, sólo que para este caso los espectros de transmisión están desplazados hacia el rojo. Por último, el análisis para BGSs se muestra en la Figura 3.27, como las resonancias Fano son altamente sensibles al tamaño del sistema se han fijado los anchos de barreras y pozos a  $dB = dW = 2$ , el ángulo de incidencia es de  $5^\circ$ . Puede observarse que cuando no existe bandgap (línea negra sólida) existe una resonancia Breit-Wigner a baja energía, una resonancia Fano alrededor de 20 meV y la formación de minibandas a altas energías, al incrementar el valor de bandgap a 10 meV (línea roja a trozos), la resonancia Fano se ha perdido por completo, y comienza a desplazarse continuamente a bajas

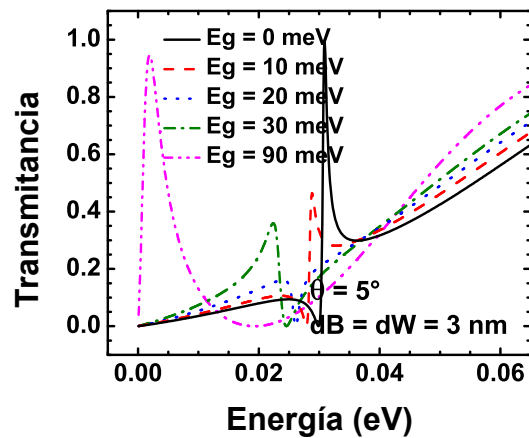


Figura 3.26: Evolución de las resonancias Fano para varios bandgaps en BGDBs. Como podemos observar, a medida que aumenta el bandgap, la resonancia Fano se corre al rojo. Además, el perfil Fano prácticamente se pierde después de un bandgap de 30 meV. Para este caso,  $V_2$  varía, mientras que  $V_1$  permanece fijo a 100 meV. En comparación con BGSBs los espectros sufrieron un desplazamiento a bajas energías.

energías donde quizás puede acoplarse débilmente con la resonancia Breit-Wigner que también se corre hacia el rojo (línea magenta). También se observa que las minibandas tienden a desplazarse al rojo pero no tan rápido como lo hace la resonancia Fano. Por lo tanto, el efecto del bandgap en BGSs anula la interacción de las resonancias Fano con las minibandas y evita la formación de resonancias híbridas.

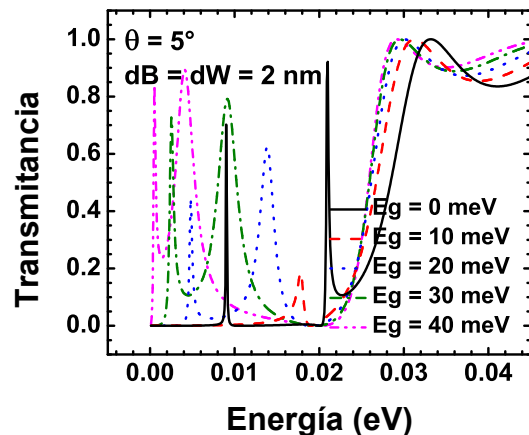


Figura 3.27: Evolución de las resonancias Fano para varios bandgaps en BGSs. Como se puede observar, a medida que aumenta el bandgap, la resonancia Fano se corre al rojo. Además, el perfil Fano prácticamente se pierde después de un bandgap de 10 meV. En este caso,  $V_2$  varía, mientras que  $V_1$  permanece fijo a 50 meV.



## Conclusiones

Se ha estudiado de manera general las resonancias Fano en sistemas multibarreras basados en doble capa de grafeno. Se calcularon las propiedades de transmisión y transporte en sistemas de una, dos y una superred de barreras de potencial dispuestas periódicamente. Para estudiar tales sistemas se hizo un análisis minucioso de dos métodos: por un lado el método de la matriz de transferencia y por otro lado el método de la matriz híbrida. Se concluyó que para el caso de sistemas basados en doble capa de grafeno la matriz de transferencia se ve afectada por el problema  $\omega d$  y que este problema de inestabilidad numérica es sensible al tamaño del sistema. Por otro lado el método de la matriz híbrida evade tal inestabilidad numérica y los resultados son fiables independientemente de los parámetros del sistema.

Con el método de la matriz híbrida como método de cálculo, el siguiente paso fue calcular las propiedades de transmisión y transporte para los sistemas antes mencionados y analizar a detalle el origen de las resonancias Fano y su huella en el transporte. Los resultados relevantes en este proyecto de tesis son:

1. Las resonancias Fano aparecen en prácticamente en todos los sistemas, es una característica intrínseca de la doble capa de grafeno, y es única en la física del estado sólido.
2. Las resonancias Fano pueden ser moduladas variando el ángulo de incidencia de los electrones,

el ancho de las regiones, el alto de las barreras y el número de períodos. Estas resonancias Fano se deben a la superposición de estados propagantes y evanescentes-divergentes en cada una de las regiones del sistema, aparecen a ángulos de incidencia pequeños, son altamente sensibles al tamaño del sistema y al alto de las barreras, además el número de períodos provoca que las resonancias Fano se interactúen con las minibandas en el caso de superredes.

3. En el caso de las superredes las resonancias Fano pueden interactuar con las minibandas naturales del sistema dando lugar a nuevos perfiles de resonancia, mejor conocidos como resonancias híbridas.
4. En las curvas de conductancia las resonancias Fano juegan un papel importante, dejan una huella característica, un salto de conductancia, que permite identificar la contribución de las resonancias en el transporte. Las curvas de conductancia presentan un perfil Fano similar al de las resonancias Fano si restringimos el cálculo de la conductancia solamente a ángulos de incidencia pequeños.
5. Al implementar el Hamiltoniano a cuatro bandas se pueden observar efectos como la no parabolicidad y la apertura del bandgap. Estos efectos modifican drásticamente el perfil asimétrico de las resonancias Fano, al grado de prácticamente desaparecerlas.

## Perspectivas

1. Una extensión natural son las llamadas superredes aperiódicas tales como superredes tipo Fibonacci, Thue-Morse, Cantor, etc. En particular, analizar a que grado la aperiodicidad modifica las resonancias Fano y en que medida pudiese usarse como parámetro adicional para poder identificar de manera fiable dichas resonancias.
2. La termoelectricidad a surgido como una alternativa para obtener energía a través de calor. Uno de los parámetros muy importantes en la termoelectricidad es la figura de mérito y en lo que respecta a semiconductores convencionales se han obtenido valores por debajo de 1. Sin embargo, investigaciones en grafeno reportan que la figura de mérito puede sobre pasar este valor. Tomando en cuenta las características fundamentales de la doble capa de grafeno, resonancias Fano y la apertura del gap, es posible que la figura de mérito se vea favorecida aún más. Por ende, la termoelectricidad en doble capa de grafeno representa una perspectiva natural al presente proyecto de tesis.



## Forma lineal asociada del operador SLM

La forma lineal asociada de este operaoor se define como

$$\mathbf{A}(x) = \mathbf{B} \cdot \frac{d\mathbf{F}(x)}{dx} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{F}(x), \quad (\text{A.1})$$

para las soluciones LI tendremos

$$\mathbf{A}_j(x) = \mathbf{B} \cdot \frac{d\mathbf{F}_j(x)}{dx} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{F}_j(x), \quad (\text{A.2})$$

donde las soluciones LI  $\mathbf{F}_j(x)$  viene expresadas en (2.62). En la doble capa tratamos  $\mathbf{P} = \mathbf{Y}$  por lo tanto

$$\mathbf{P} = \frac{\hbar^2 k_y}{2m} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.3})$$

sustituyendo en (A.2) los elementos correspondientes, después de acomodar los términos obtenemos que

$$\mathbf{A}_j(x) = \left| \begin{array}{l} \frac{\hbar^2}{2m}(E - V_0)(k_y + iq_j)^2 \\ -\frac{\hbar^2}{2m}(k_y^2 + q_j^2)(k_y + iq_j)^2 \end{array} \right| e^{iq_j x}. \quad (\text{A.4})$$



Entonces de acuerdo con (2.56), tendremos que

$$\mathbf{A}_j(x) = \begin{vmatrix} \frac{\hbar^2}{2m}(E - V_0)(k_y + iq_j)^2 \\ -\frac{\hbar^2}{2m}(E - V_0)(k_y + iq_j)^2 \end{vmatrix} e^{iq_j x}; \quad j = 1, 2, \quad (\text{A.5})$$

$$\mathbf{A}_j(x) = \begin{vmatrix} \frac{\hbar^2}{2m}(E - V_0)(k_y + iq_j)^2 \\ \frac{\hbar^2}{2m}(E - V_0)(k_y + iq_j)^2 \end{vmatrix} e^{iq_j x}; \quad j = 3, 4. \quad (\text{A.6})$$

## Estados Confinados en una barrera rectangular basada en doble capa de grafeno

La discordancia de la quiralidad a incidencia normal en un sistema de una barrera basado en doble capa de grafeno da lugar a los llamados estados confinados. Estos estados son de carácter confinado y son prácticamente invisibles para los estados que están fuera de la barrera. De hecho, es posible calcularlos escribiendo el problema de eigenvalores en la base de  $\sigma_x$ ,  $\sigma_x \psi_{\pm} = \pm \psi_{\pm}$ ,

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - q_y^2 \pm (V(x) - E) \right) \psi_{\pm} = 2q_y \frac{d\psi_{\mp}}{dx}. \quad (\text{B.1})$$

A incidencia normal  $q_y = 0$  no hay mezcla entre las componentes  $\psi_{\pm}$ , entonces la ecuación (B.1) toma la forma

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \pm (V(x) - E) \right) \psi_{\pm} = 0. \quad (\text{B.2})$$

La componente  $\psi_-$  da los estados confinados mientras que la componente  $\psi_+$  representa a los estados propagantes fuera de la barrera. En el caso de barreras rectangulares,  $V(x) = V_0$  para  $0 < x < dB$  y  $V(x) = 0$  en cualquier otro lado, las eigenfunciones están dadas por

$$\psi_-(x) = \begin{cases} C_L e^{\kappa_x x}, & x < 0, \\ Ae^{iq_x x} + Be^{-iq_x x}, & 0 < x < dB, \\ C_R e^{-\kappa_x x}, & x > dB, \end{cases} \quad (\text{B.3})$$

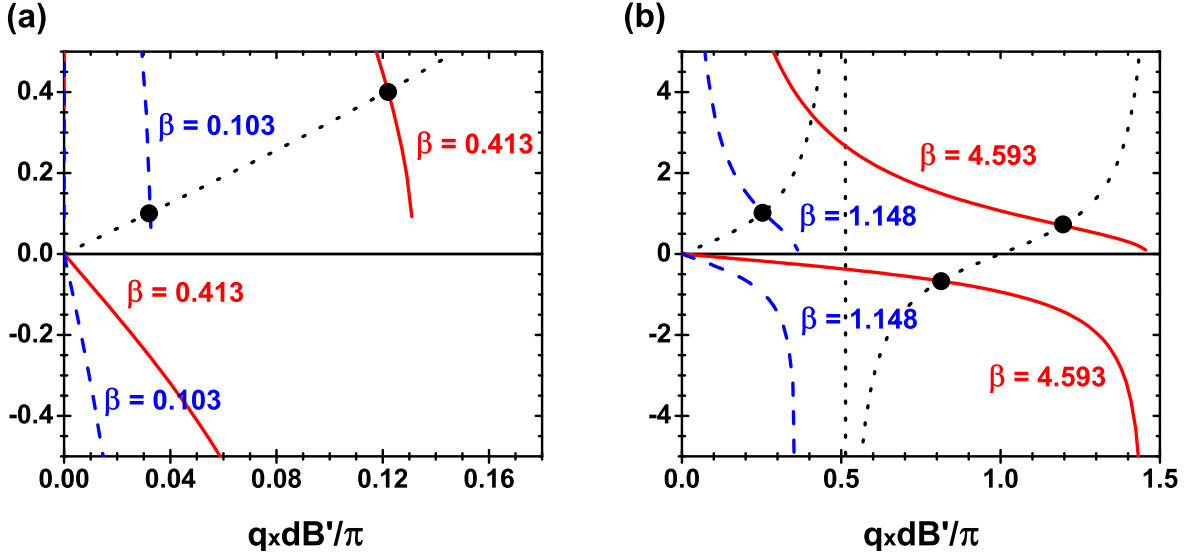


Figura B.1: Soluciones gráficas de las ecuaciones (B.5) y (B.6) para los estados confinados en BGSBs. La línea negra punteada representa  $\tan(q_x dB')$ , mientras que las curvas roja sólida y azul a trazos corresponden a las ramas  $\sqrt{\beta^2 - (q_x dB')^2}/q_x dB'$  y  $-q_x dB'/\sqrt{\beta^2 - (q_x dB')^2}$ . En todos los casos el alto de la barrera es  $V_0 = 50$  meV. En (a) las curvas roja sólida y azul a trazos corresponden a  $dB = 3$  nm ( $\beta = 0.103$ ) y  $dB = 6$  nm ( $\beta = 0.413$ ) respectivamente, mientras que en (b) las mismas curvas corresponden a  $dB = 10$  nm ( $\beta = 1.148$ ) and  $dB = 20$  nm ( $\beta = 4.593$ ). Las líneas verticales negras punteadas son las asíntotas de  $\tan(q_x dB')$ . Los estados confinados están determinados por las intersecciones de las curvas negras punteadas con las curvas roja sólida y azul a trazos.

donde  $q_x = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$  y  $\kappa_x = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ . La condición de continuidad de la función de onda y su derivada en la frontera  $x = 0$  y  $x = dB$ , permite obtener la ecuación trascendental que determina los estados acotados

$$\cot(q_x dB) = -\frac{1}{2} \left[ \frac{\kappa_x}{q_x} - \frac{q_x}{\kappa_x} \right]. \quad (\text{B.4})$$

En realidad, esta ecuación tiene dos ramas,

$$\tan(q_x dB') = \frac{1}{q_x dB'} \sqrt{\beta^2 - (q_x dB')^2}, \quad (\text{B.5})$$

$$\tan(q_x dB') = -\frac{q_x dB'}{\sqrt{\beta^2 - (q_x dB')^2}}, \quad (\text{B.6})$$

donde  $dB' = dB/2$  y  $\beta^2 = 2mV_0 dB'^2/\hbar^2$ . Al resolver estas ecuaciones gráficamente se pueden obtener los estados confinados sustituyendo los valores específicos de  $q_x dB'$  en la siguiente ecuación,

$$E_b = V_0 \left[ 1 - \frac{(q_x dB')^2}{\beta^2} \right]. \quad (\text{B.7})$$

Los resultados gráficos para los casos de barreras simples se presentan en las Figuras B.1 y B.2.

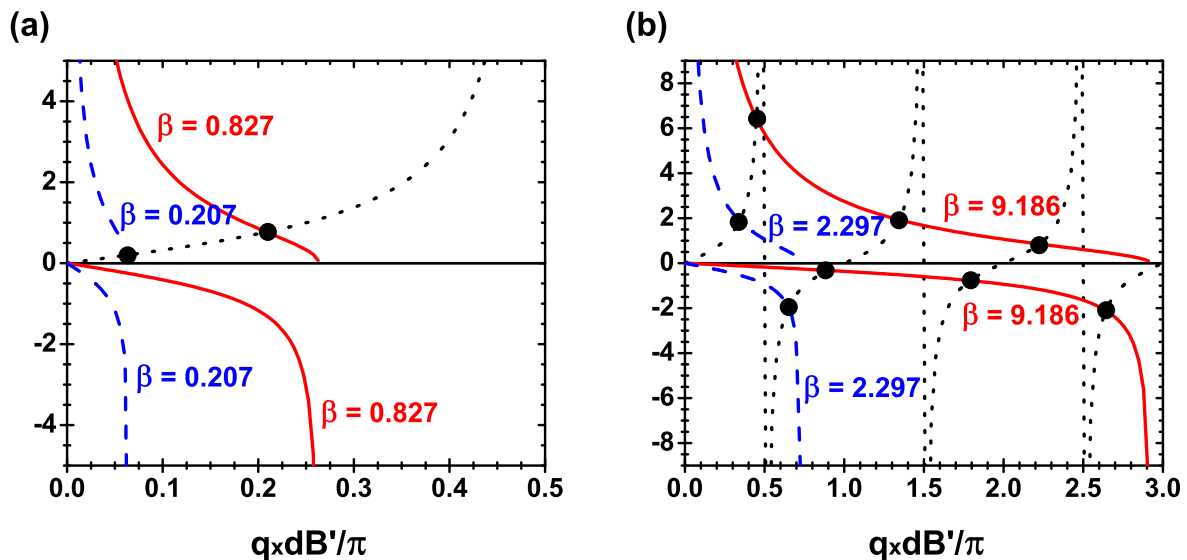


Figura B.2: Los parámetros son los mismos que en la Figura B.1 pero aquí  $V_0 = 100$  meV.

En la tabla B.1 mostramos las energías específicas de los estados confinados para diferentes casos de barreras simples estudiadas en el presente trabajo.

Tabla B.1: Energías de los estados confinados para BGSBs calculados con los valores de  $q_x dB'$  obtenidos por medio del método gráfico, Figs. B.1 and B.2. Las energías están dadas en meV, mientras que las longitudes en nm.  $\beta$  y  $q_x dB'$  son parámetros adimensionales.

$\beta$	$V_0$	$dB'$	$(q_x dB'/\pi)_{b1}$	$E_{b1}$	$(q_x dB'/\pi)_{b2}$	$E_{b2}$	$(q_x dB'/\pi)_{b3}$	$E_{b3}$
0.103	50	1.5	0.032614000	0.52				
0.413	50	3.0	0.121933969	7				
1.148	50	5.0	0.254616366	26				
4.593	50	10.0	0.409608906	46	0.812446482	36	0.812446482	17
0.207	100	1.5	0.064540495	4				
0.827	100	3.0	0.208673872	37				
2.297	100	6.0	0.344052483	78	0.650717012	21		
9.186	100	10.0	0.450735867	98	0.900365990	91	1.34754225	79

# Bibliografía

- [1] L. Pauling, *The Nature of the Chemical Bond* (Cornell University Press, 1960).
- [2] M. I. Katsnelson, *Graphene Carbon in Two Dimensions* (Cambridge University Press, 2012).
- [3] H. Eyring, J. Walter & G. E. Kimball, *Quantum Chemistry* (Cornell University Press, 1946).
- [4] M. I. Katsnelson Carbon in two dimensions. *Materials today* **10**, 20 (2007).
- [5] R. E. Peiers Quelques propriétés typiques des corps solides. *Ann. Inst. Henri Poincaré* **5**, 177(1935).
- [6] L. D. Landau On the theory of phase transitions. *Phys. Z. Sowjetunion* **11**, 26 (1937).
- [7] L. D. Landau & E. M. Lifshitz, *Statistical Physics Part I* (Pergamon, Oxford, 1980).
- [8] K. S. Novoselov *et al.* Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science* **306**, 666 (2004).
- [9] P. R. Wallace The band theory of graphite. *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947).
- [10] J. W. McClure Diamagnetism of graphite. *Phys. Rev.* **104**, 666 (1956).
- [11] J. C. Slonczewski & P. R. Weiss Band structure of graphite. *Phys. Rev.* **109**, 272 (1958).

- [12] K. S. Novoselov *et al.* Room-temperature quantum Hall effect in graphene. *Science* **315**, 1379 (2007).
- [13] M. I. Katsnelson Zitterbewegung, chirality, and minimal conductivity in graphene. *Eur. Phys. J. B* **51**, 157 (2006).
- [14] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov & A. K. Geim Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene. *Nature Phys.* **2**, 620 (2006).
- [15] F. D. M. Haldane Model for a quantum Hall effect without Landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly". *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2015 (1988).
- [16] O. Klein Die Reflexion von Elektronen an einem Potentialsprung nach der relativistischen Dynamik von Dirac. *Z. Phys.* **53**, 157 (1929).
- [17] A. F. Young, & P. Kim Quantum interference and Klein tunnelling in graphene heterojunctions. *Nature Phys.* **5**, 222 (2009).
- [18] A. Calogeracos & N. Dombey History and physics of the Klein paradox. *Contemp. Phys.* **40**, 313 (1999).
- [19] J. M. Pereira *et al.* Confined states and direction-dependent transmission in graphene quantum wells. *Phys. Rev. B* **74**, 045424 (2006).
- [20] V. P. Gusynin & S. G. Sharapov Unconventional integer quantum Hall effect in graphene. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146801 (2005).
- [21] K. S. Novoselov *et al.* Unconventional quantum Hall effect and Berry's phase of  $2\pi$  in bilayer graphene. *Nature* **2**, 177 (2006).
- [22] C.-S. Park Aharonov-Bohm effect in bilayer graphene. *Phys. Lett. A* **381** 1831 (2017).
- [23] T. Nakanishi & K. Terakura Theory of Fano effects in an Aharonov-Bohm ring with a quantum dot. *Phys. Rev. B* **69**, 115306 (2004).

- [24] E. McCann & Mikito Koshino M. The electronic properties of bilayer graphene. *Rep. Prog. Phys.* **76**, 056503 (2013).
- [25] M. S. Dresselhaus & G. Dresselhaus Intercalation compounds of graphite. *Adv. Phys.* **51**, 1 (2002).
- [26] J. C. Charlier, J. P. Michenaud & X. Gonze First-principles study of the electronic properties of simple hexagonal graphite. *Phys. Rev. B* **46**, 4531 (1992).
- [27] E. McCann & V. I. Falko Landau-level degeneracy and quantum Hall effect in a graphite bilayer. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 086805 (2006).
- [28] N. Gu, M. Rudner & L. Levitov Chirality-Assisted Electronic Cloaking of Confined States in Bilayer Graphene. *Phys. Rev. Lett.* **107**, 156603 (2011).
- [29] K. Lee, S. Lee, Y. S. Eo, C. Kurdak, C. & Z. Zhong Evidence of electronic cloaking from chiral electron transport in bilayer graphene nanostructures. *Phys. Rev. B*, **94** 205418 (2016).
- [30] E. McCann, D. S. L. Abergel & V. I. Falko Electrons in bilayer graphene. *Solid State Commun.* **143**, 110 (2007).
- [31] Y. S. Joe, A. M. Satanin & C. S. Kim Classical analogy of Fano resonances. *Phys. Scr.* **74**, 259(2006).
- [32] A. E. Miroshnichenko, S. Flach & Y. S. Kivshar Fano resonances in nanoscale structures. *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2257 (2010).
- [33] G. Breit & E. Wigner Capture of Slow Neutrons. *Phys. Rev.* **49**, 519 (1936).
- [34] H. Beutler Über Absorptionsserien von Argon, Krypton und Xenon zu Termen zwischen den beiden Ionisierungsgrenzen  ${}^2P_{3/2}^0$  und  ${}^2P_{1/2}^0$ . *Z. Phys. A* **93**, 177 (1935).
- [35] U. Fano U. Sullo spettro di assorbimento dei gas nobili presso il limite dello spettro d'arco. *Nuovo Cimento* **12**, 154 (1935).



- [36] U. Fano U. Effects of Configuration Interaction on Intensities and Phase Shifts. *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961).
- [37] M. D. Sturge, H. J. Guggenheim, & M. H. L. Pryce Antiresonance in the optical spectra of transition-metal ions in crystals. *Phys. Rev. B*, **2** 2459 (1970).
- [38] S. E. Harris Laser without inversion: Interference of lifetime-broadened. *Phys. Today*, **50** 36 (1997).
- [39] F. W. Perkins Heating tokamaks via the ion-cyclotron and ion-ion hybrid resonances. *Nucl. Fusion*, **17** 1197 (1977).
- [40] M. Kroner *et al.* The nonlinear Fano effect. *Nature (London)*, **451** 311 (2008).
- [41] T. W. Canzler *et al.* Fano resonances in semiconductor superlattices. *Phys. E* **10** 593 (2001).
- [42] T.-T. Tang *et al.* A tunable phonon?exciton Fano system in bilayer graphene. *Nat. Nanotech.* **5**, 32 (2010).
- [43] S. Mukhopadhyay, R. Biswas & C. Sinha Signature of quantum interference and the Fano resonances in the transmission spectrum of bilayer graphene nanostructure. *J. Appl. Phys.* **110**, 014306 (2011).
- [44] S. Mukhopadhyay, R. Biswas & C. Sinha Tunable Fano resonances in the ballistic transmission and tunnelling lifetime in a biased bilayer graphene nanostructure. *Phys. Lett. A* **375**, 2921 (2011).
- [45] C. Sinha & R. Biswas Unconventional ballistic transport through bilayer graphene electrostatic barriers. *Phys. Rev. B*, **84** 155439 (2011).
- [46] J. A. Briones-Torres, R. Pernas-Salomón, R. Pérez-Álvarez & I. Rodríguez-Vargas Hybrid matrix method for stable numerical analysis of the propagation of Dirac electrons in gapless bilayer graphene. *Superlattice. Microst.* **93** 186 (2016).

- [47] J. A. Briones-Torres & I. Rodríguez-Vargas Fano resonances in bilayer graphene superlattices. *Sci. Rep.* **7(1)** 16708 (2017).
- [48] Luk'yanchuk, B. *et. al.* The Fano resonance in plasmonic nanostructures & metamaterials. *Nat. Mater.* **9** 707-715 (2010).
- [49] M. V. Rybin, D. S. Filonov, P. A. Belov, Y. S. Kivshar & M. F. Limonov Switching from Visibility to Invisibility via Fano Resonances: Theory and Experiment. *Sci. Rep.*, **5** 8774 (2015).
- [50] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer & P. Kim Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene. *Nature*, **438** 201 (2005).
- [51] B. Van Duppen & F. M. Peeters Four-band tunneling in bilayer graphene. *Phys. Rev. B*, **87** 205427 (2013).
- [52] P. Markos & C. M. Soukoulis, *Wave Propagation: From Electrons to Photonic Crystals & Left-Handed Materials* (Princeton University Press, 2008).
- [53] P. Yeh, *Optical waves in layered media* (John Wiley y Sons, Inc., New Yersey, 2005).
- [54] E. L. Tan Hybrid compliance-stiffness matrix method for stable analysis of elastic wave propagation in multilayered anisotropic media. *J. Acoust. Soc. Am.*, **119** 45 (2006).
- [55] R. Pérez-Álvarez & F. García-Moliner, *Transfer Matrix, Green Function & related techniques: Tools for the study of multilayer heterostructures* (Universitat Jaume I, Castellón de la Plana, Spain, 2004).
- [56] R. Pérez-Álvarez, R. Pernas-Salomón & V. R. Velasco Relations Between Transfer Matrices and Numerical Stability Analysis To Avoid The  $\Omega d$  Problem. *SIAM J. Appl. Math.* **75** (2015) 1403.

- [57] R. Pernas-Salomón & R. Pérez-Álvarez Sturm-Liouville Matrix Equation for the Study of Electromagnetic-Waves Propagation in Layered Anisotropic Media. *Prog. Electromagn. Res. M* **40** (2014) 79.
- [58] W. Lu, W. Li, C. Xu & C. Ye Destruction of anti-Klein tunnelling induced by resonant states in bilayer graphene. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **48** 285102 (2015).
- [59] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press, 1995.
- [60] A. Rahman, J. W. Guikema, M. Hassan & N. Markovic Angle-dependent transmission in graphene heterojunctions. *Appl. Phys. Lett.*, **106** 013112 (2015).
- [61] R. N. Sajjad & A. W. Ghosh Manipulating Chiral Transmission by Gate Geometry: Switching in Graphene with Transmission Gaps. *ACS nano*, **7** 9808 (2013).
- [62] R. N. Sajjad, S. Sutar, J. U. Lee & A. W. Ghosh Manifestation of Chiral tunneling at a tilted graphene  $p - n$  junction. *Phys. Rev. B*, **86** 155412 (2012).
- [63] S. Sutar *et. al.* Angle-Dependent Carrier Transmission in Graphene  $p - n$  Junctions. *Nano Lett.* **12** 4460 (2012).

# Publicaciones

A continuación se muestra una lista con las publicaciones que surgieron del trabajo de la presente tesis

1. J. A. Briones-Torres, R. Pernas-Salomón, R. Pérez-Álvarez & I. Rodríguez-Vargas **Hybrid matrix method for stable numerical analysis of the propagation of Dirac electrons in gapless bilayer graphene**. *Superlattice. Microst.* **93** 186 (2016).
2. J. A. Briones-Torres & I. Rodríguez-Vargas **Fano resonances in bilayer graphene superlattices**. *Sci. Rep.* **7(1)** 16708 (2017).
3. J. A. Briones-Torres, R. Pernas-Salomón & I. Rodríguez-Vargas **Destruction of Fano resonances in bilayer graphene superlattices by bandgap opening and non-parabolicity effects**. *En proceso* (2018).