

Universidad Autónoma de Zacatecas
"Francisco García Salinas"
Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la
Materia

Matriz de transferencia en problemas 1D en materiales 2D

T E S I S

Doctorado en Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia

PRESENTA

M. en C. Manuel Ibarra Reyes

DIRECTOR DE TESIS

Dr. Isaac Rodríguez Vargas

Dr. Rolando Pérez Álvarez

Zacatecas, México

5 de septiembre de 2024

Agradecimientos

A la Universidad Autónoma de Zacatecas, especialmente a la Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia (LUMAT) por abrirme sus puertas para realizar mis estudios que han sido bastante satisfactorios.

Al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías (CONAHCyT) por apoyarme durante parte de mi posgrado, con una beca generosa. Esto me permitió dedicarme con más ahínco a las actividades propias de mi Doctorado.

A la planta de profesores por su apoyo, dedicación y esfuerzo, por transmitirnos sus valiosas enseñanzas que serán parte de mi vida y la de mis compañeros.

Especialmente quiero dejar patente mi gran agradecimiento a mi Director de tesis, el Dr. Isaac Rodríguez Vargas docente LUMAT y al Dr. Rolando Pérez Álvarez.

También agradecer a mis compañeros por su amistad durante este período.

A mi familia por su apoyo y, también su exigencia para que culminara este proceso en mi vida profesional.

Matriz de transferencia en problemas 1D en materiales 2D

Resumen

Desde el descubrimiento del grafeno de manera teórica en la década de 1940, hasta su obtención de manera experimental en la primera década del año 2000; se han estudiado diferentes materiales que cumplen con características similares y se les ha denominado como materiales bidimensionales. Hoy en día, estos materiales son una realidad, y, han sido de gran interés desde el punto de vista fundamental, como lo pueden ser el tunelaje de Klein, anti tunelaje de Klein, refracción negativa, entre otros, y, desde luego, desde lo aplicado, como puede ser en que tengan una alta conductividad térmica, flexibilidad, permeabilidad o impermeabilidad, anisotropía o isotropía, entre muchas otras características exóticas. Esto nos lleva a pensar en una posible revolución tecnológica con dispositivos más veloces, flexibles, duraderos, con mayor capacidad de almacenamiento, etc. En la actualidad existen varios materiales bidimensionales como lo son el siliceno, los dicalcogenuros de metales de transición, grafeno en bicapa, fosforeno, etc. Existen características comunes en muchos de ellos, sobre todo en el carácter de los portadores de carga que vienen dados por sus hamiltonianos, estos caracterizan a los portadores de carga en sus puntos de alta simetría, estos hamiltonianos son similares desde el punto de vista matemático y por lo tanto se pueden tratar de la misma manera; como son, la monocapa de grafeno, siliceno y los dicalcogenuros de metales de transición. Debido a estas similitudes, en este trabajo se obtienen expresiones matemáticas cerradas generales para cada tipo de hamiltoniano, en las cuales se puede calcular el coeficiente de transmisión y los estados acotados. El método que ha funcionado en el cálculo de estas expresiones para estos sistemas con dispersión cuadrática, es el conocido como método de matriz de transferencia. Sin embargo, estas expresiones no se pueden utilizar en estos materiales debido a la diferencia en su estructura matemática, por lo que en estos materiales no se pueden definir las diferentes matrices de transferencia existentes para los materiales semiconductores. En este trabajo también se analiza la continuidad de los estados de transmisión perfecta con los estados acotados como en el caso de los semiconductores. Expresiones que existen en los materiales convencionales que son sistemas con dispersión cuadrática, pero no en los materiales bidimensionales.

Abstract

Since the theoretical discovery of graphene in the 1940s to its experimental realization in the early 2000s, different materials with similar characteristics have been studied and are referred to as bidimensional materials. Nowadays, these materials are a reality and have been of great interest both from a fundamental point of view, such as Klein Tunneling, Anti-Klein Tunneling, negative refraction, among others, and from an applied perspective, such as their high thermal conductivity, flexibility, permeability or impermeability, anisotropy or isotropy, and many other exotic features. This leads us to consider a potential technological revolution with faster, flexible, durable devices with greater storage capacity, etc. Currently, there are several bidimensional materials such as silicene, transition metal dichalcogenides, bilayer graphene, phosphorene, and others. Many of these materials share common characteristics, especially in the nature of charge carriers determined by their Hamiltonians. These Hamiltonians characterize the charge carriers at their points of high symmetry and are mathematically similar, allowing them to be treated in a similar manner; examples include monolayer graphene, silicene, and transition metal dichalcogenides. Due to these similarities, this work derives general closed-form mathematical expressions for each type of Hamiltonian, which can be used to calculate the transmission coefficient and bound states. The method that has been effective in calculating these expressions for systems with quadratic dispersion is the well-known Transfer-Matrix Method. However, these expressions cannot be applied to these materials due to the transfer in their mathematical structure, meaning that different transfer matrices for semiconductor materials cannot be defined in these materials. This work also examines the continuity of perfect transmission states with bound states, similar to the expressions found in conventional semiconductor materials with quadratic dispersion, but not in bidimensional materials.

Matriz de transferencia en problemas 1D en materiales 2D

Notaciones

$L(x)$	Operador diferencial matricial
B	Coficiente matricial del término de segundo orden
P	Coficiente matricial del término cruzado de primer orden
Y	Coficiente matricial del término de primer orden
W	Coficiente matricial del término lineal
M	Matriz de transferencia total
T	Matriz de transferencia asociada
K	Matriz de transferencia de coeficientes
S	Matriz de transferencia de scattering
A	Forma lineal asociada de la matriz T
v_F	Velocidad de Fermi
p	Momento lineal
τ	Vector de matrices de Pauli
I	Matriz unitaria
σ	Índice de espín ($\sigma = \pm 1$)
η	Índice de valle $K(\eta = 1)$ y $K'(\eta = -1)$
Γ_{SO}	Energía de interacción espín órbita
Δ_z	Diferencia de energía potencial entre sub-redes
F_U	Componente up del espinor
F_D	Componente down del espinor
$V(x)$	Potencial electrostático dependiente de x
k_x	Vector de onda en dirección x
k_y	Vector de onda en dirección y .

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	V
Notaciones	VII
Índice general	VIII
1. Introducción	1
1.1. Antecedentes	1
1.2. Materiales bidimensionales	5
1.3. Motivación	13
1.4. Objetivos	13
2. Matriz de transferencia	15
2.1. Sturm-Liouville y matrices de transferencia	15
2.2. Ecuación de primer orden y su matriz de transferencia	20
2.2.1. Matrices $P(x)$, $Y(x)$ y $W(x)$ constantes	21
3. Resultados	23
3.1. Hermiticidad	23
3.1.1. Grafeno	23
3.1.2. Siliceno	26
3.1.3. TMD's	28

3.2. Matriz de transferencia	29
3.2.1. Grafeno	29
3.2.2. Siliceno	31
3.2.3. TMDs	34
3.3. Estados acotados	36
3.3.1. Grafeno	37
3.3.2. Siliceno	39
3.3.3. TMDs	41
3.4. Probabilidad de transmisión	43
3.4.1. Grafeno	44
3.4.2. Siliceno	46
3.4.3. TMDs	48
3.5. Estados acotados en general	49
3.6. Probabilidad de transmisión en general	50
3.7. Estados de transmisión perfecta	52
3.7.1. Grafeno	53
3.7.2. Siliceno	57
3.7.3. TMD's	60
3.8. Transmitancia y semitraza de la matriz de transferencia	63
3.8.1. Grafeno	63
3.8.2. Siliceno	65
3.8.3. TMDs	67
4. Conclusiones	69
Productos académicos	71
Referencias	71

Capítulo 1

Introducción

1.1. Antecedentes

Los materiales bidimensionales se caracterizan por tener un espesor muy pequeño del orden de muy pocos átomos, sin embargo a pesar de sus dimensiones han demostrado tener características muy exóticas como el caso de la monocapa de grafeno. La monocapa de grafeno es más fuerte que el acero y ha demostrado tener altas conductividades térmicas y eléctricas [1,2]. A diferencia de los semiconductores comunes, sus portadores de carga tienen características cuántico relativista [3], lo que nos da una gran gama de posibles aplicaciones debido a que no solo aprovechamos el movimiento de los electrones, también podemos aprovechar el movimiento de los huecos, ya sea para la generación de corriente o para almacenar información. En la actualidad existen varios materiales bidimensionales algunos de manera teórica y otros sintetizados de manera experimental, cada uno con sus características y propiedades particulares [4]. Algunos de estos materiales tienen un hamiltoniano similar [5–7], el cual nos caracteriza a los portadores de carga en sus puntos de alta simetría. Desde el punto de vista matemático son hamiltonianos similares, sólo con algunos términos adicionales que impactan en su parte cinética o energética, sin embargo se pueden tratar de la misma manera. En este trabajo se realiza una generalización para el caso de la monocapa de grafeno, siliceno y los dicalcogenuros de metales de transición (TMDs) que tienen un hamiltoniano similar, los portadores de carga que impactan en este hamiltoniano son del tipo Dirac (cuántico

relativistas) [3], a diferencia de semiconductores comunes [8]. En el caso de los materiales convencionales, los portadores de carga son electrones tipo Schřodinger y para encontrar expresiones matemáticas cerradas se utiliza el método de matriz de transferencia. Según el tipo de matriz de transferencia que se utilice, transfiere diferentes propiedades a través de un potencial. Para definir estas matrices se parte de la ecuación de Sturm-Liouville en su forma matricial [9]:

$$\mathbf{L}(z) \cdot \mathbf{F}(z) \equiv \frac{d}{dz} [\mathbf{B}(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}}{dz} + \mathbf{P}(z) \cdot \mathbf{F}(z)] + \mathbf{Y}(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{W}(z) \cdot \mathbf{F}(z) = 0, \quad (1.1)$$

donde $\mathbf{L}(z)$ es el operador diferencial matricial, \mathbf{B} , \mathbf{P} , \mathbf{Y} , y \mathbf{W} son los coeficientes matriciales que pueden depender de z . Por lo que cualquier sistema que se pueda escribir de esta manera, se puede tratar con la ecuación de Sturm-Liouville; la estructura de la expresión anterior da la posibilidad de manejar muchos problemas de propagación de excitaciones elementales. En los semiconductores normales, con esta expresión se definen varios tipos de matrices como lo son [9]: **Matriz total**; este tipo de matriz transfiere la amplitud del campo y la derivada del campo de un punto de la estructura a otro punto, su forma es:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F}(\alpha : z) \\ \mathbf{F}'(\alpha : z) \end{pmatrix} = \mathbf{M}(\alpha : z, z_0) \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{F}(\alpha : z_0) \\ \mathbf{F}'(\alpha : z_0) \end{pmatrix}, \quad (1.2)$$

donde, α es un dominio que puede ser finito o semi-infinito, \mathbf{F} es el campo y \mathbf{F}' es la derivada del campo, cabe mencionar que como \mathbf{F} es un vector de N dimensiones, \mathbf{M} es la matriz total de dimensión $2N \times 2N$, z_0 es la evaluación en algun punto arbitrario.

Matriz asociada; esta matriz transfiere la amplitud del campo y su forma lineal asociada de un punto a otro de la estructura:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F}(\alpha : z) \\ \mathbf{A}(\alpha : z) \end{pmatrix} = \mathbf{T}(\alpha : z, z_0) \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{F}(\alpha : z_0) \\ \mathbf{A}(\alpha : z_0) \end{pmatrix}, \quad (1.3)$$

donde \mathbf{F} es la amplitud del campo, \mathbf{A} es la forma lineal asociada, \mathbf{T} es la matriz asociada. La

forma lineal asociada está dada por:

$$\mathbf{A}(\alpha : z) = \mathbf{P}(\alpha : z) \cdot \mathbf{F}(\alpha : z) + \mathbf{B}(\alpha : z) \cdot \mathbf{F}'(\alpha : z). \quad (1.4)$$

Matriz de transferencia de coeficientes; esta es la matriz que más se utiliza en la literatura, transfiere los coeficientes asociados a las soluciones de un punto de la estructura a otro, tiene la forma:

$$a(\alpha') = \mathbf{K}(\alpha', \alpha) \cdot \mathbf{a}(\alpha), \quad (1.5)$$

donde, $a(\alpha)$ es el vector formado por los elementos $a_j(\alpha)$ y \mathbf{K} es la matriz de transferencia de coeficientes. De acuerdo a su forma, se puede ver que esta matriz transfiere el conjunto de coeficientes a_j de α a α' . **Matriz de scattering;** esta matriz relaciona las ondas que entran a las que salen, tiene la forma:

$$\begin{pmatrix} a^-(L) \\ a^+(R) \end{pmatrix} = \mathbf{S}(R; L) \cdot \begin{pmatrix} a^+(L) \\ a^-(R) \end{pmatrix}, \quad (1.6)$$

aquí, los superíndices $+/-$ se refieren a las ondas viajando hacia la derecha/izquierda, a^\pm es igual que en la matriz anterior, sin embargo \mathbf{S} relaciona los extremos de la estructura. Aunque en los materiales bidimensionales se pueden estudiar de la misma manera, partiendo de la ecuación de Sturm-Liouville, hablamos de 2 situaciones completamente distintas, como son el grado del hamiltoniano que describen estos materiales o el hecho de que en los convencionales, para tener estados acotados debemos tener bien claro si la perturbación que tenemos es un pozo o una barrera para tener estos estados y en el caso de los materiales bidimensionales no es necesario invertir esa polaridad ya que uno atrapa electrones y el otro atrapa huecos, por mencionar algunas. R. Pérez-Álvarez *et. al.* [8], realizan un análisis con los electrones de Schrödinger aplicando algunas de las matrices antes descritas, los autores encuentran una expresión analítica, compacta y cerrada a través de un potencial arbitrario para el coeficiente de transmisión, los estados acotados y la continuidad entre ellos. Las expresiones que se derivan en el trabajo mencionado son: Para estados

acotados:

$$k_1 M_{22} + k_2 M_{11} + k_1 k_2 M_{12} + M_{21} = 0. \quad (1.7)$$

Para la probabilidad de transmisión:

$$T = \frac{4k_1 k_2 \left(\frac{m_2}{m_1}\right)}{[k_2 M_{11} + k_1 M_{22}]^2 + [k_1 k_2 M_{12} - M_{21}]^2}, \quad (1.8)$$

donde k_1 y k_2 son los vectores de onda en las dos regiones semi-infinitas y M_{ij} son los elementos de la matriz de transferencia, m_1 y m_2 son las masas de los electrones afuera y dentro de la perturbación.

Se debe mencionar que aunque los autores no lo mencionan, para derivar esta expresión se utilizó la matriz de transferencia total. Los estados de transmisión perfecta por electrones de Schrödinger son aquellos que tienen una energía $E_r > \max(V_1, V_2)$ de tal manera que $T(E_r) = 1$. $V_{1,2}$ son los potenciales en los medios semi infinitos y E_r es la energía de la onda. En el artículo [8] los autores examinan este comportamiento con potencial y masa constantes, es decir que $m_1 = m_2 = m$, $V_1 = V_2 = V_0$ y $k_1 = k_2 = k$ por encontrarse en el mismo medio, de tal manera, la Ec. (1.8) se puede escribir como:

$$\frac{4k^2}{k^2[M_{11} + M_{22}]^2 + [k^2 M_{12} - M_{21}]^2} = 1. \quad (1.9)$$

Sí se cambia alguno de los parámetros, por ejemplo la profundidad del pozo, la E_r cambiará, decrecerá, por lo que existe un valor para este parámetro de tal manera que $E_r = V_0$ y en este caso $k = 0$ por estar en la interfaz del pozo de potencial. En este caso, el denominador de la Ec. (1.9) debe ser cero; comparando con la Ec. (1.7) para los estados acotados, se puede ver que M_{21} debe ser igual a cero, esta condición es consistente con la aparición de un estado acotado, $M_{21} = 0$ de la Ec. (1.7). Hasta donde nosotros sabemos, no existe un tratamiento similar para los materiales bidimensionales, es decir, para electrones tipo Dirac. En el siguiente capítulo indagaremos más sobre el uso de la ecuación de Sturm- Liouville en los hamiltonianos que describen a los materiales bidimensionales.

1.2. Materiales bidimensionales

Grafeno

En los últimos años el estudio de los materiales bidimensionales ha sido de gran interés científico. Desde el descubrimiento de manera teórica de un material que tuviera una relación de dispersión lineal a mediados de siglo pasado [3, 10], hasta su descubrimiento en la parte experimental en el año del 2004 a partir del grafito mediante exfoliación micromecánica [11] Fig. 1.1, material al cual se le denominó grafeno, que es un nanomaterial de carbono bidimensional del grosor de un átomo, que a pesar de ser tan fino y ligero, es un material sumamente resistente. Tiene propiedades exóticas como su alta elasticidad, alta conductividad tanto térmica como eléctrica. Aplicaciones en la ingeniería médica, el efecto Hall anómalo debido a la existencia de los huecos [12] siendo uno de los materiales más estudiados en la ciencia actual [13–20]. Otro aspecto interesante, es que, debido a su estructura y sus puntos de alta simetría Fig. 1.2 los electrones tienen un comportamiento cuántico relativista [3]. Los vectores que se utilizan para generar la red del grafeno son:

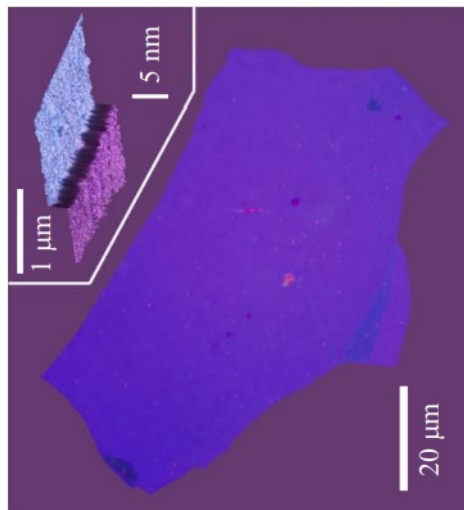


Figura 1.1: Fotografía de una hojuela de grafeno con un grosor aproximado de 3 nm sobre una oblea de óxido de silicio [17].

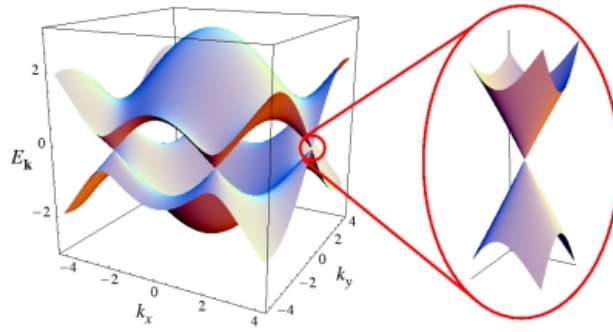


Figura 1.2: Estructura de bandas del grafeno. En la ampliación se pueden apreciar los llamados conos de Dirac [21].

$$\vec{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, \frac{a}{2} \right), \quad (1.10)$$

$$\vec{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, -\frac{a}{2} \right). \quad (1.11)$$

Y los vectores para el espacio recíproco son:

$$\vec{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a} \right), \quad (1.12)$$

$$\vec{b}_2 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{a} \right). \quad (1.13)$$

Podemos ver la celda unitaria y la primera zona de Brillouin en las siguientes imágenes. Para

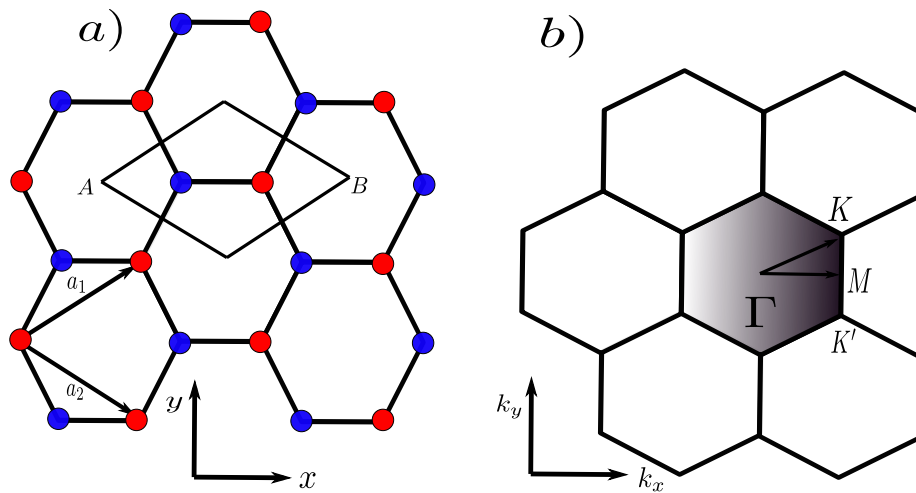


Figura 1.3: En la figura se muestra en a) la celda unitaria, los puntos rojos y azules representan los átomos de carbono de las dos redes. En b) la primera zona de Brillouin del grafeno.

estudiar las propiedades del grafeno se puede utilizar el hamiltoniano efectivo tipo Dirac [5]:

$$\hat{H} = v_F \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{p} + V(x) \mathbf{I}, \quad (1.14)$$

donde, $v_F \approx 10^6 \text{ m s}^{-1}$ es la velocidad de Fermi, $\boldsymbol{\tau} = (\boldsymbol{\tau}_x, \boldsymbol{\tau}_y)$ son las matrices de Pauli, $V(x)$ es el potencial dependiente de x , $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ es el vector de momento, el cual lo consideramos como $p_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$, $p_y = \hbar k_y$ y \mathbf{I} es la matriz identidad de 2×2 .

Siliceno

Hasta el año de 2007, se creía que el grafeno reemplazaría al silicio en el mercado de la electrónica. Pero no fue así, principalmente por los costos de la producción en masa del grafeno, además de no tener un gap intrínseco. Sin embargo, abrió la pauta para el estudio de otros materiales parecidos en estructura y dimensiones, como fue el caso del siliceno [22–24] (material isoestructurado como el grafeno, pero con base de silicio). Al tener un gap natural ha sido el enfoque para todo el estudio electrónico, las primeras estructuras que se observaron fueron sobre sustrato de plata, a diferencia del grafeno, se sintetizó por deposiciones de vapores químicos, al no tener en la naturaleza un alótropo como en el grafeno, que es el grafito. En ese mismo año, se pudo sintetizar este material bidimensional [25, 26], que cuenta con una estructura parecida a la del grafeno. El encontrar otro material con características exóticas a bajas dimensiones, abrió la puerta para la investigación de la existencia de otros materiales bidimensionales parecidos, como es el caso del estaneno, el germaneno, el fosforeno entre muchos otros [27]. Su estructura vista desde arriba es similar a la del grafeno, pero si tenemos una vista lateral es diferente, tiene una pequeña distorsión en la horizontal de los átomos, creando 2 capas. El silicio es un elemento químico metaloide, de número atómico 14 y perteneciente al grupo 14 o IV de la tabla periódica. El silicio es el segundo elemento más abundante en la corteza terrestre, además de que es un buen semiconductor, por lo que tiene una gran presencia en la electrónica. El silicio tiene una estructura electrónica $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2$ y $3p^2$, que es similar a la del carbono, por lo que es posible crear una red hexagonal en forma de panal de abeja, estructura conocida como siliceno, similar al grafeno. El silicio tiene una hibridación

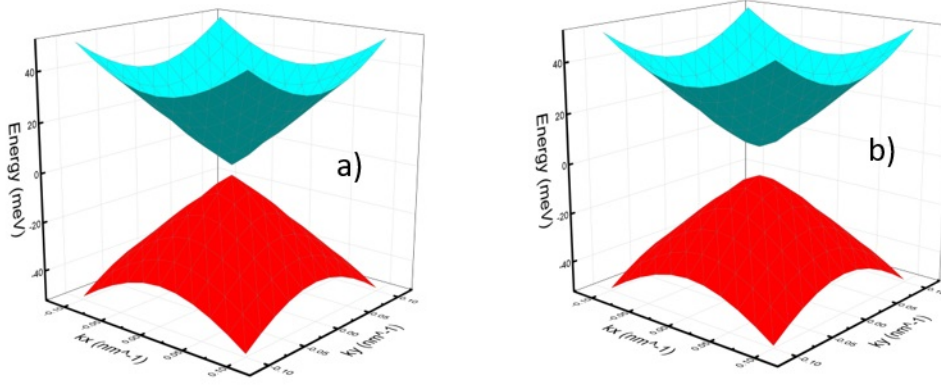


Figura 1.4: Relación de dispersión del siliceno, para el valle K (a) espín up y (b) espín down.

más próxima a sp^3 a diferencia del carbono que su hibridación es sp^2 , esta diferencia favorece a la aparición de una ondulación o flexión en las láminas del siliceno, creando un gap natural en dicho material. Es importante mencionar que este material no se encuentra en la naturaleza como en el caso del carbono, por lo que su síntesis es artificial [28]. La exploración de este material es debido a sus aplicaciones electrónicas ya que por su estructura contiene un ancho de banda prohibida [28] a diferencia del grafeno que su ancho de banda es cero. La estructura del siliceno permite que sea sensible a la interacción con el sustrato, superficie química y acoplamiento espín-órbita, permitiéndole una gran variedad de aplicaciones novedosas, tales como bits topológicos, sensibilidad cuántica, magnetorresistencia gigante [28] que es un efecto mecánico cuántico que se presenta en estructuras de películas delgadas compuestas de capas alternadas ferromagnéticas y no magnéticas que se pueden utilizar en los discos duros de las computadoras, lo que implica una revolución en la tecnología de semiconductores [29]. La relación de dispersión del siliceno cambia dependiendo del índice de valle o del espín, como se muestra en la Fig. 1.4. Para estudiar las propiedades del siliceno se puede utilizar el hamiltoniano efectivo tipo Dirac de baja energía [6]:

$$H = v_F(\mathbf{p}_x\tau_x - \eta\mathbf{p}_y\tau_y) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)\tau_z + V(x), \quad (1.15)$$

donde, $v_F \approx 0.5 \times 10^6 \text{m s}^{-1}$ es la velocidad de Fermi, $\tau = (\tau_x, \tau_y)$ son las matrices de Pauli, $V(x)$ es el potencial dependiente de x , Γ_{SO} es la interacción espín órbita, Δ_z es la diferencia de energía potencial entre las 2 subredes, $\sigma = \pm 1$ es el índice de espín del electrón y $\eta = \pm 1$ es

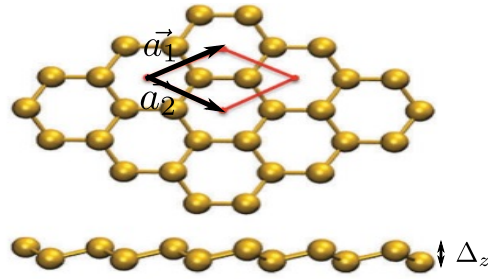


Figura 1.5: En la parte superior es una vista de la estructura cristalina del siliceno, donde se muestra la celda unitaria. En la parte inferior se muestra una vista lateral de la estructura cristalina en la cual se puede apreciar la distorsión en la vertical por el tipo de enlaces $sp^2 - sp^3$ que se presentan en siliceno [30].

el índice de valle. Podemos observar que su hamiltoniano tiene algunos términos no contenidos en el hamiltoniano del grafeno, sin embargo su estructura es similar, por lo que, en principio, matemáticamente, se pueden manejar de la misma manera. En la Fig. 1.5, se muestra la celda unitaria del siliceno representada mediante dos subredes triangulares que contienen 2 átomos de silicio formada por los vectores a_1 y a_2 . Los vectores que definen la celda unitaria son:

$$\vec{a}_1 = a \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad (1.16)$$

$$\vec{a}_2 = a \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right). \quad (1.17)$$

Con una separación atómica de $a \approx 3.86 \text{ \AA}$ [31]. La red recíproca también es una red hexagonal tipo panal, con los vectores unitarios:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \left(1, \frac{\sqrt{3}}{3} \right), \quad (1.18)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \left(-1, \frac{\sqrt{3}}{2} \right). \quad (1.19)$$

En la primera zona de Brillouin Fig. 1.6 se deben destacar los puntos de alta simetría K y K' .

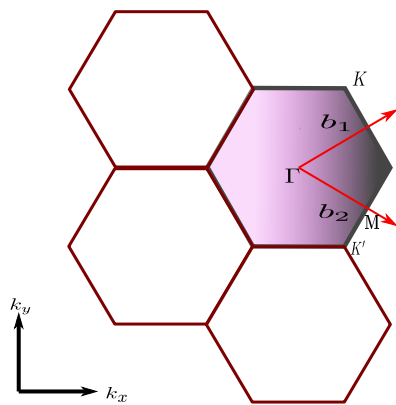


Figura 1.6: Primera zona de Brillouin del siliceno. Se muestran los vectores en el espacio recíproco \vec{b}_1 y \vec{b}_2 .

TMDs

Los calcogenuros son una serie de compuestos químicos que contienen un anión formado por un elemento anfígeno (grupo 16) y un elemento metal de carácter electropositivo. En el caso del oxígeno estos derivados son denominados óxidos, siendo el término calcogenuro empleado para referirse a los sulfuros, seleniuros y telururos. Los dicalcogenuros de metales de transición son materiales que presentan una estructura laminar en un apilamiento de tricapas con grosor de apenas 3 átomos. Los átomos dentro de una tricapa están ligados por uniones covalentes, pero las sucesivas tricapas interactúan entre sí principalmente mediante fuerzas de Van der Waals. Cada tricapa consiste de un plano de átomos de metal de transición entre dos planos, superior e inferior, de S, Se o Te. Los átomos metálicos se ordenan en forma de una red hexagonal [32]. A diferencia del grafeno, estos materiales son semiconductores del tipo MX_2 , donde la M es un átomo del metal de transición (como Mo o W) y X es el calcogenuro (como S, Se o Te) [33], por lo que proveen una alternativa natural al problema del grafeno. El más estudiado de los TMDs es el Disulfuro de Molibdeno (MoS_2). Los TMDs exhiben un bandgap directo, un fuerte acoplamiento espín-órbita y propiedades favorables en el área de la mecánica, la electrónica y la optoelectrónica, siendo una de las razones por la cual existe tanto interés en el estudio de estos materiales [33, 34]. Poseen características especiales en áreas de conversión de energía y nanotecnología como por ejemplo la superconductividad, suelen ser materiales muy estables, resistentes, poseen una gran movilidad de

carga y pueden absorber y emitir grandes cantidades de luz (fluorescencia) [32, 33], al igual que el grafito los TMDs están formados por monocapas unidas entre sí por fuerzas de Van der Waals, formando multicapas, las monocapas de TMDs tienen propiedades distintas a la de la monocapa de grafeno, estas van desde el carácter metálico a semiconductor [33]. En el caso de los TMDs, la relación de dispersión no es simétrica como en el caso del siliceno, por lo que varía en las cuatro combinaciones posibles del espín y del índice de valle, ver Fig. 1.7. El TMD más usado en la

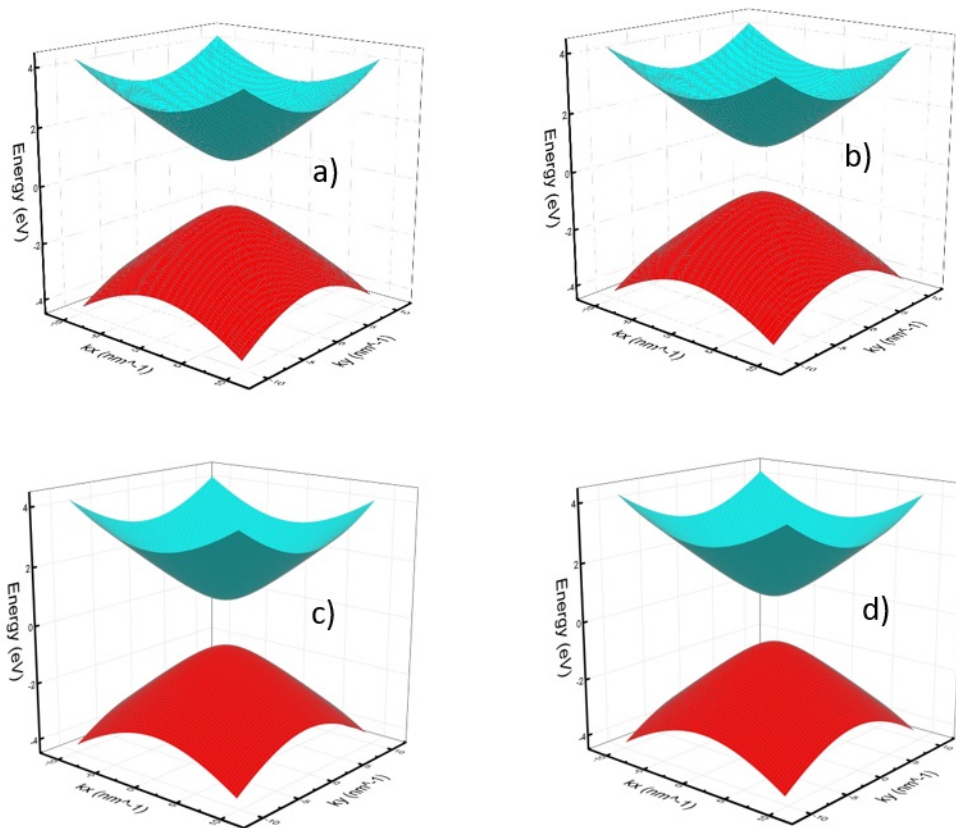


Figura 1.7: Relación de dispersión del MoS_2 . En el inciso a) el índice de valle es K espín up, en el inciso b) el índice de valle K espín down, en el c) el índice de valle es K' espín up y en el d) el índice de valle es K' espín down.

actualidad es el MoS_2 [33], la monocapa de este material tiene un gap directo, sin embargo en multicapas tiene gap indirecto. Las monocapas poseen un alto rendimiento cuántico, emitiendo gran cantidad de luz [33], por lo que su aplicación directa es en nanotecnología como transistores, LEDs y detectores [35]. La primera zona de Brioullin para el MoS_2 la podemos ver en la Fig. 1.10. Para estudiar las propiedades de los dicalcogenuros se puede utilizar el hamiltoniano de baja

TABLA PERIÓDICA DE LOS ELEMENTOS

La tabla periódica muestra los elementos químicos clasificados en grupos y períodos. Una leyenda central indica las categorías de los elementos:

- Gases nobles:** Elementos en el grupo 18.
- Halógenos:** Elementos en el grupo 17.
- No metales:** Elementos en los grupos 14, 15 y 16.
- Otros metales:** Elementos en los grupos 13, 14 y 15.
- Metales alcalinos:** Elementos en el grupo 1.
- Metales de transición:** Elementos en los grupos 3 a 10.
- Alcalinotérreos:** Elementos en el grupo 2.
- Lantánidos:** Elementos en el grupo 3, bloques f.
- Actínidos:** Elementos en el grupo 3, bloques f.

El elemento Oxígeno (O) se destaca con un recuadro naranja, mostrando su número atómico (8) y masa atómica (15.9). Se indican también su símbolo químico (O) y nombre.

Figura 1.8: Tabla periódica de los elementos químicos. En el grupo 16 podemos apreciar los anfígenos con los cuales se forman los calcógenos [36].

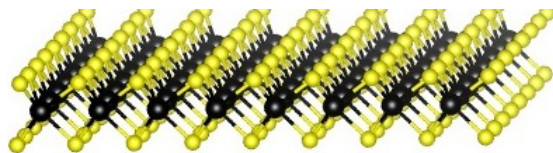


Figura 1.9: Estructura cristalina de un dicalcogenuro. En la imagen se puede apreciar que la capa del metal de transición se encuentra entre dos capas de anfígenos [37].

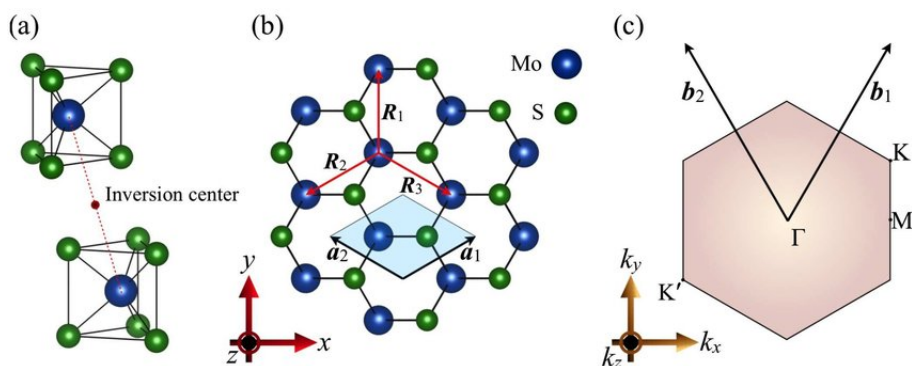


Figura 1.10: En a) se muestra la celda unitaria del MoS_2 , el punto rojo representa una inversión del centro. En b) tenemos una vista superior del MoS_2 , los puntos azules representan átomos del molibdeno y los verdes los del azufre. En c) se muestra la primera zona de Brillouin [38].

energía como [7]:

$$H = v_F(\mathbf{p}_x\eta_z\tau_x + \mathbf{p}_y\tau_y) + \Delta_z\tau_z + (\Gamma_{SO}\eta\sigma_z - \Gamma_{SO}\eta_z\sigma_z\tau_z) + V(x), \quad (1.20)$$

donde, $v_F \approx 5.3 \times 10^5 \text{ m s}^{-1}$ es la velocidad de Fermi, $\boldsymbol{\tau} = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$ son las matrices de Pauli, $V(x)$ es el potencial electrostático dependiente de x , $4\Gamma_{SO} \approx 150 \text{ meV}$ es el efecto spin órbita, $2\Delta_z \approx 1.66 \text{ eV}$ es la diferencia de energía potencial entre subredes, $\sigma = \pm 1$ es el índice de espín del electrón y $\eta = \pm 1$ es el índice de valle. Podemos ver que este hamiltoniano tiene algunos factores que no se encuentran en los hamiltonianos ni del grafeno ni del siliceno, sin embargo su estructura matemática es la misma, por lo que, en principio, se puede trabajar de la misma manera que los anteriores.

1.3. Motivación

En el caso de los semiconductores, a partir de la ecuación de Sturm-Liouville se definen una serie de matrices de transferencia y con ellas se deducen expresiones matemáticas cerradas para el cálculo de propiedades de sumo interés como son los estados acotados, el coeficiente de transmisión y la continuidad entre ellos. En particular, no conocemos un tratamiento de la misma índole para el caso de los materiales bidimensionales. Por lo que nos es interesante saber si se pueden derivar expresiones del mismo tipo en estos materiales, y más aún, debido a lo similar de algunos de sus hamiltonianos, definir expresiones generales para los estados acotados, el coeficiente de transmisión y la continuidad entre ellos.

1.4. Objetivos

Establecer el método de matriz de transferencia en materiales bidimensionales con electrones tipo Dirac desde el formalismo de Sturm-Liouville. En particular:

- Analizar cuáles matrices de las mencionadas anteriormente se pueden definir en el grafeno, siliceno y los TMDs.

- Encontrar expresiones matemáticas analíticas y cerradas para el cálculo de estados acotados y probabilidad de transmisión en los materiales tales como el grafeno, siliceno y TMD's.
- Deducir expresiones generales para los estados acotados y la probabilidad de transmisión, que se puedan utilizar en cualquier material bidimensional que tenga hamiltonianos matemáticamente similares.
- Demostrar e ilustrar numéricamente en casos concretos, la continuidad entre las energías de los estados acotados y las energías de los estados de transmisión perfecta.

Capítulo 2

Matriz de transferencia

En este capítulo procederemos a analizar la ecuación de Sturm-Liouville y su relación con las matrices de transferencia en materiales bidimensionales.

2.1. Sturm-Liouville y matrices de transferencia

Existe una gran variedad de excitaciones elementales en heteroestructuras de materiales, pueden ser por ejemplo, ondas magnéticas, elásticas, acústicas, fenómenos con electrones tipo Schrödinger, electrones sin masa, etc. Estos sistemas se pueden modelar como si fuesen varias ecuaciones acopladas en las cuales existe una continuidad entre las interfaces de los medios semi infinitos y la perturbación. Por lo que es esencial plasmar métodos generales para la solución de dichos problemas, un método de gran potencia es el conocido como método de matriz de transferencia; en el caso de los semiconductores existe un tratado muy extenso para definir los tipos de matrices de transferencia que se pueden definir en este tipo de materiales [9], en este trabajo se parte de la ecuación de Sturm-Liouville y se definen una serie de matrices de transferencia, con diferentes características y propiedades. Para visualizar estas matrices, consideremos un campo que puede estar descrito por N amplitudes, definamos un vector $\mathbf{F}(x)$ puesto que en los materiales bidimensionales, sólo son relevantes las coordenadas x y y , siendo sus N componentes las amplitudes. De esta manera, una gran cantidad de problemas de física de gran interés, se pueden describir por un

sistema diferencial ordinario de segundo orden que se puede escribir de la forma:

$$\mathbf{L}(x) \cdot \mathbf{F}(x) \equiv \frac{d}{dx} [\mathbf{B}(x) \cdot \frac{d\mathbf{F}}{dx} + \mathbf{P}(x) \cdot \mathbf{F}(x)] + \mathbf{Y}(x) \cdot \frac{d\mathbf{F}(x)}{dx} + \mathbf{W}(x) \cdot \mathbf{F}(x) = 0, \quad (2.1)$$

donde $\mathbf{L}(x)$ es el operador diferencial matricial, \mathbf{B} , \mathbf{P} , \mathbf{Y} , y \mathbf{W} son los coeficientes de los términos en nuestra ecuación diferencial de segundo grado.

De esta ecuación en el libro [9] se definen las siguientes matrices.

1. *Matriz de transferencia total*, comúnmente se escribe como $M(\alpha : x, x_0)$. Este tipo de matriz transfiere las amplitudes y las derivadas desde un punto x_0 a un punto x .

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F}(\alpha : x) \\ \mathbf{F}'(\alpha : x) \end{pmatrix} = M(\alpha : x, x_0) \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{F}(\alpha : x_0) \\ \mathbf{F}'(\alpha : x_0) \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

2. *Matriz de transferencia asociada*, comúnmente se escribe como $T(\alpha : x, x_0)$. Transfiere la amplitud del campo y su forma diferencial lineal

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F}(\alpha : x) \\ \mathbf{A}(\alpha : x) \end{pmatrix} = T(\alpha : x, x_0) \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{F}(\alpha : x_0) \\ \mathbf{A}(\alpha : x_0) \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

3. *Matriz de transferencia de coeficientes*, denotada por $K(\alpha', \alpha)$. Esta matriz es una situación completamente distinta ya que involucra dos zonas distintas en el dominio α y α' , además α' la podemos calcular analíticamente por ejemplo en la situación planteada con anterioridad, si conocemos las bases $\mathbf{F}_j(\alpha : x)$ y $\mathbf{F}_j(\alpha : x')$.

$$\mathbf{F}(\alpha : x) = \sum_j a_j(\alpha) \mathbf{F}_j(\alpha : x), \quad (2.4)$$

$$\mathbf{F}(\alpha' : x) = \sum_j a_j(\alpha') \mathbf{F}_j(\alpha' : x), \quad (2.5)$$

Aquí la sumatoria sobre j va desde 1 hasta $2N$. Si consideramos un $a(\alpha)$ de tal manera que sea el vector formado por los $a_j(\alpha)$. Entonces podemos definir:

$$a(\alpha') = K(\alpha', \alpha) \cdot a(\alpha). \quad (2.6)$$

Entonces, esta matriz transfiere los coeficientes a_j del dominio α al dominio α' .

Si hablamos de un material continuo, de tal manera que los dominios α y α' continuos, tomando en cuenta que α está en el lado izquierdo y α' en el lado derecho de la interface en x_1 y considerando los puntos $x_0 < x_1 < x$ donde x_0 pertenece al dominio de α y x pertenece al dominio de α' y como la forma lineal \mathbf{A} es continua en la interface de los dominios, la matriz de transferencia asociada tiene la propiedad de la cadena es decir.

$$T(x_2, x_0) = T(\alpha' : x_2, x_1) \cdot T(\alpha : x_1, x_0). \quad (2.7)$$

Sin embargo, para la matriz total esto no se cumple en general, sólo si la derivada \mathbf{F}' es continua por lo que podemos usar una matriz de cople $C(x_1)$ para eliminar la discontinuidad de \mathbf{F}' en el punto x_1 .

$$M(x_2, x_0) = M(\alpha' : x_2, x_1 + 0) \cdot C(x_1) \cdot M(\alpha : x_1 - 0, x_0). \quad (2.8)$$

De esta manera tenemos la continuidad para la matriz de transferencia total. Para definir estas

matrices se utilizó una base $\mathbf{F}_j(x)$, consideremos $\mathbf{F}_1(x)$ y \mathbf{F}_2 y otra base con $\psi_1(x)$ y $\psi_2(x)$.

$$\mathbf{F}_1(x) = a_{11}\psi_1(x) + a_{12}\psi_2(x), \quad (2.9)$$

$$\mathbf{F}_2(x) = a_{21}\psi_1(x) + a_{22}\psi_2(x), \quad (2.10)$$

$$N^{(F)}(x) = \begin{vmatrix} \mathbf{F}_1(x) & \mathbf{F}_2(x) \end{vmatrix} \quad (2.11)$$

$$= |a_{11}\psi_1(x) + a_{12}\psi_2(x) + a_{21}\psi_1(x) + a_{22}\psi_2(x)|$$

$$= \begin{vmatrix} \psi_1(x) & \psi_2(x) \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}$$

$$= N^{(\psi)}(x) \cdot \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix},$$

$$\begin{aligned} M^{(F)}(x, x_0) &= N(x) \cdot [N(x_0)]^{-1} \\ &= N^{(\psi)}(x) \cdot \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} \cdot \left[N^{(\psi)}(x_0) \cdot \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} \right]^{-1} \\ &= N^{(\psi)}(x) \cdot [N^{(\psi)}(x_0)]^{-1} \\ &= M^{(\psi)}(x, x_0). \end{aligned}$$

Se puede hacer lo mismo para la matriz de transferencia total y de la misma manera, no depende de la base, caso diferente a la matriz de coeficientes en la cual si depende de la base. En general, los diferentes tipos de matrices de transferencia tienen algunas propiedades elementales.

Matriz de transferencia total.

1. Si $x_0 < x_1 < x_2$ y tanto su base \mathbf{F} como su derivada \mathbf{F}' son continuas en el punto x_1 , entonces tiene la propiedad de la cadena.

2. El determinante $[\det M(x, x_0) = 1]$

3. $M(x, x) = I_{2N}$.

Matriz de transferencia asociada.

1. Si $x < x_1 < x_2$, la matriz asociada tiene la propiedad de la cadena.

2. T se relaciona con M mediante otra matriz de relación como:

$$T(x, x_0) = R(x) \cdot M(x, x_0) \cdot R(x_0)^{-1}. \quad (2.12)$$

3. $T(x, x) = I_{2N}$.

4. Comúnmente el determinante $\det[T(x, x_0)]$ es una constante igual a la unidad.

Matriz de transferencia de coeficientes

1. La matriz de transferencia de coeficientes K depende de la base.

2. Si escogemos para el dominio L/R una base, y \mathbf{T} es canónica en x_l/x_r , entonces en el esquema de $\mathbf{K}(R, L) = \mathbf{T}(x_r, x_l)$.

3. El determinante de \mathbf{K} depende de la base que se escoja y del sistema diferencial propuesto.

4. Si L y R concuerdan en $x_l = x_r = x$ entonces $\mathbf{T} = \mathbf{I}_{2N}$ y por lo tanto:

$$\mathbf{K}(R, L) = [\mathbf{Q}(R : x)]^{-1} \cdot \mathbf{Q}(L : x). \quad (2.13)$$

5. Asumiendo que la región M está descrita en términos de una base conocida. Entonces la matriz de transferencia de coeficientes tiene la regla de la cadena:

$$\mathbf{K}(R, L) = \mathbf{K}(R, M) \cdot \mathbf{K}(M, L). \quad (2.14)$$

Cabe resaltar que esta matriz relaciona los dominios, mientras que la matriz total y la asociada relacionan posiciones locales. En el caso de los materiales bidimensionales, no se pueden definir estas matrices, ya que los hamiltonianos son de un orden distinto, además de que hablamos de electrones sin masa, por lo que tenemos que tratarlos con cuidado.

2.2. Ecuación de primer orden y su matriz de transferencia

La ecuación de primer orden que nos interesa en su forma general se escribe:

$$\frac{d}{dx}(\mathbf{P}(x)\mathbf{F}(x)) + \mathbf{Y}(x)\frac{d\mathbf{F}(x)}{dx} + \mathbf{W}(x)\mathbf{F}(x) = 0, \quad (2.15)$$

donde $\mathbf{F}(x)$ es una matriz con dos filas y una columna. $\mathbf{P}(x)$ y $\mathbf{Y}(x)$ son matrices de dos columnas y dos filas. La hermiticidad exige que entre $\mathbf{P}(x)$ y $\mathbf{Y}(x)$ exista la relación $\mathbf{P}(x) = -\mathbf{Y}^\dagger(x)$. Realmente la ecuación (2.15) no es una ecuación, sino un sistema de dos ecuaciones diferenciales acopladas de primer orden. Llamemos $\mathbf{F}_1(x)$, $\mathbf{F}_2(x)$ a dos soluciones linealmente independientes de (2.15). Entonces, cualquier solución se puede escribir como.

$$\mathbf{F}(x) = a_1\mathbf{F}_1(x) + a_2\mathbf{F}_2(x) = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_1(x) & \mathbf{F}_2(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Si evaluamos en el punto arbitrario x_0 , tendremos que

$$\mathbf{F}(x_0) = a_1\mathbf{F}_1(x_0) + a_2\mathbf{F}_2(x_0), \quad (2.17)$$

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_1(x_0) & \mathbf{F}_2(x_0) \end{pmatrix}^{-1} \mathbf{F}(x_0). \quad (2.18)$$

Sustituyendo en la ecuación original

$$\mathbf{F}(x) = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_1(x) & \mathbf{F}_2(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{F}_1(x_0) & \mathbf{F}_2(x_0) \end{pmatrix}^{-1} \mathbf{F}(x_0), \quad (2.19)$$

$$\mathbf{F}(x) = \mathbf{M}(x, x_0)\mathbf{F}(x_0), \quad (2.20)$$

con:

$$\mathbf{M}(x, x_0) = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_1(x) & \mathbf{F}_2(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{F}_1(x_0) & \mathbf{F}_2(x_0) \end{pmatrix}^{-1}. \quad (2.21)$$

Esta es la matriz de transferencia para la ecuación (2.15), esto es así cualquiera sea la forma de la ecuación mencionada. La diferencia entre un caso y otro estará en la forma de las matrices $\mathbf{P}(x)$, $\mathbf{Y}(x)$ y $\mathbf{W}(x)$ y por lo tanto en las soluciones LI.

2.2.1. Matrices $\mathbf{P}(x)$, $\mathbf{Y}(x)$ y $\mathbf{W}(x)$ constantes

Si las matrices $\mathbf{P}(x)$, $\mathbf{Y}(x)$ y $\mathbf{W}(x)$ son constantes, la ecuación (2.15). Adopta una forma más simple:

$$\mathbf{C} \frac{d\mathbf{F}(x)}{dx} + \mathbf{W}\mathbf{F}(x) = 0, \quad (2.22)$$

donde,

$$\mathbf{C} = \mathbf{P} + \mathbf{Y}. \quad (2.23)$$

Las soluciones LI se buscan poniendo $\mathbf{F}(x) = \mathcal{F}e^{iq_x x}$ (\mathcal{F} es una matriz columna de 2×1).

$$\mathcal{F} = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_U \\ \mathcal{F}_D \end{pmatrix}, \quad (2.24)$$

$$(iq_x \mathbf{C} + \mathbf{W})\mathcal{F} = 0. \quad (2.25)$$

Por componentes:

$$(iq_x C_{11} + W_{11})\mathcal{F}_U + (iq_x C_{12} + W_{12})\mathcal{F}_D = 0, \quad (2.26)$$

$$(iq_x C_{21} + W_{21})\mathcal{F}_U + (iq_x C_{22} + W_{22})\mathcal{F}_D = 0. \quad (2.27)$$

De aquí que los dos valores posibles de q_x se obtengan de la ecuación:

$$(iq_x C_{11} + W_{11})(iq_x C_{22} + W_{22}) - (iq_x C_{12} + W_{12})(iq_x C_{21} + W_{21}) = 0, \quad (2.28)$$

$$-q_x^2 \det(C) + iq_x (C_{11}W_{22} + C_{22}W_{11} - C_{12}W_{21} - C_{21}W_{12}) + \det(W) = 0. \quad (2.29)$$

Capítulo 3

Resultados

En este capítulo se realizarán los cálculos para deducir las expresiones de nuestro interés para los materiales bidimensionales, así como un tratamiento en la continuidad de los estados de transmisión perfecta con los estados acotados.

3.1. Hermiticidad

En la Mecánica matricial, en donde todos los operadores son matrices, una matriz hermitiana es simplemente una matriz para la cual la transpuesta del conjugado complejo (sus elementos) es igual a la matriz original. Un operador hermítico tiene la propiedad de que sus autovalores son números reales. Primero comprobemos la hermiticidad en las ecuaciones de movimiento de los materiales de interés.

3.1.1. Grafeno

Analicemos el caso general del grafeno. Tomemos la expresión de su hamiltoniano (1.14) y tomemos en cuenta sus eigenvalores:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x). \tag{3.1}$$

Realizando un cambio de notación ya que en esta línea de trabajo es más común utilizar $F(x)$ en vez de $\psi(x)$.

$$\hat{H}F(x) = EF(x). \quad (3.2)$$

Reescribiendo el hamiltoniano:

$$v_F(\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{p})F = (E - V(x))F, \quad (3.3)$$

$$v_F(\tau_x p_x + \tau_y p_y)F = (E - V(x))F. \quad (3.4)$$

Considerando el problema en una dimensión sobre el eje x , podemos escribir la función de onda como:

$$F(x, y) = F(x)e^{ik_y y}, \quad (3.5)$$

$$F(x) = \begin{pmatrix} F_U(x) \\ F_D(x) \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

de tal manera que podemos escribir el hamiltoniano como:

$$i\hbar v_F \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \left(\frac{d}{dx} \right) + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} ik_y \right] \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} + (E - V(x)) \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} = 0, \quad (3.7)$$

$$i\hbar v_F \left[\begin{pmatrix} 0 & \frac{d}{dx} \\ \frac{d}{dx} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & k_y \\ -k_y & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} + (E - V(x)) \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} = 0, \quad (3.8)$$

$$i\hbar v_F \left[\begin{pmatrix} \frac{dF_D}{dx} \\ \frac{dF_U}{dx} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} k_y F_D \\ -k_y F_U \end{pmatrix} \right] + (E - V(x)) \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} = 0, \quad (3.9)$$

donde los subíndices U y D se refieren a las componentes up y down respectivamente. Por lo que tenemos que:

$$(E - V(x))F_U + i\hbar v_F \left(\frac{dF_D}{dx} + k_y F_D \right) = 0, \quad (3.10)$$

$$(E - V(x))F_D + i\hbar v_F \left(\frac{dF_U}{dx} - k_y F_U \right) = 0. \quad (3.11)$$

En su forma matricial.

$$\begin{pmatrix} 0 & i\hbar v_F \\ i\hbar v_F & 0 \end{pmatrix} \frac{d}{dx} \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} E - V(x) & i\hbar v_F k_y \\ -i\hbar v_F k_y & E - V(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Donde podemos ver cuales serán los coeficientes de la ecuación matricial de Sturm-Liouville.

$$\mathbf{B}(x) = 0. \quad (3.13)$$

$$\mathbf{P}(x) + \mathbf{Y}(x) = i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

$$\mathbf{W}(x) = \begin{pmatrix} E - V(x) & i\hbar v_F k_y \\ -i\hbar v_F k_y & E - V(x) \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

Como se ha mencionado anteriormente, requerimos que se tenga hermiticidad y lo podemos comprobar de la siguiente manera.

$$\mathbf{P}^\dagger(x) + \mathbf{Y}^\dagger(x) = -i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = -(\mathbf{P}(x) + \mathbf{Y}(x)), \quad (3.16)$$

por lo tanto es una matriz anti-hermiteana.

$$\mathbf{W}^\dagger(x) = \begin{pmatrix} E - V(x) & i\hbar v_F k_y \\ -i\hbar v_F k_y & E - V(x) \end{pmatrix} = \mathbf{W}(x), \quad (3.17)$$

por lo que sí es hermiteana.

3.1.2. Siliceno

Para el caso del siliceno, tomemos su hamiltoniano (1.15) y encontremos de la misma manera los coeficientes de la ecuación de Sturm-Liouville.

$$\begin{aligned}
E \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} &= [v_F(p_x\tau_x - \eta p_y\tau_y) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)\tau_z + V(x)] \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix}, \\
&= i\hbar v_F \left[\frac{d}{dx} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - i\eta k_y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} - [\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z] \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} + V(x) \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} \\
&= i\hbar v_F \left[\frac{d}{dx} \begin{pmatrix} F_D \\ F_U \end{pmatrix} - i\eta k_y \begin{pmatrix} -iF_D \\ iF_U \end{pmatrix} \right] - [\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z] \begin{pmatrix} F_U \\ -F_D \end{pmatrix} + V(x) \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix}, \\
&= i\hbar v_F \left[\begin{pmatrix} \frac{dF_D}{dx} \\ \frac{dF_U}{dx} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \eta k_y F_D \\ -\eta k_y F_U \end{pmatrix} \right] - [\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z] \begin{pmatrix} F_U \\ -F_D \end{pmatrix} + V(x) \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix}, \\
&= i\hbar v_F \left[\begin{pmatrix} \frac{dF_D}{dx} - \eta k_y F_D \\ \frac{dF_U}{dx} + \eta k_y F_U \end{pmatrix} \right] - [\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z] \begin{pmatrix} F_U \\ -F_D \end{pmatrix} + V(x) \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix}, \\
\begin{pmatrix} EF_U \\ EF_D \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} i\hbar v_F \frac{dF_D}{dx} - i\hbar v_F \eta k_y F_D \\ i\hbar v_F \frac{dF_U}{dx} + i\hbar v_F \eta k_y F_U \end{pmatrix} - [\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z] \begin{pmatrix} F_U \\ -F_D \end{pmatrix} + V(x) \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix},
\end{aligned}$$

$$EF_U = i\hbar v_F \frac{dF_D}{dx} - i\hbar v_F \eta k_y F_D - [\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z] F_U + V(x) F_U, \quad (3.18)$$

$$EF_D = i\hbar v_F \frac{dF_U}{dx} + i\hbar v_F \eta k_y F_U + [\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z] F_D + V(x) F_D. \quad (3.19)$$

En su forma matricial:

$$\begin{pmatrix} 0 & i\hbar v_F \\ i\hbar v_F & 0 \end{pmatrix} \frac{d}{dx} \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V(x) - \sigma\eta\Gamma_{SO} + \Delta_z - E & -i\hbar v_F \eta k_y \\ i\hbar v_F \eta k_y & V(x) + \sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} = 0. \quad (3.20)$$

Por lo que al comparar con la forma de Sturm-Liouville, tenemos que:

$$\mathbf{B}(x) = 0, \quad (3.21)$$

$$\mathbf{Y}(x) + \mathbf{P}(x) = -i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.22)$$

$$\mathbf{W}(x) = \begin{pmatrix} E - V(x) + \sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z & i\hbar v_F \eta k_y \\ -i\hbar v_F \eta k_y & E - V(x) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z) \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

Y al comprobar la hermiticidad de las matrices, tenemos que:

$$\mathbf{Y}^\dagger(x) + \mathbf{P}^\dagger(x) = i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = -(\mathbf{Y}(x) + \mathbf{P}(x)), \quad (3.24)$$

por lo que es anti-hermiteana.

$$\mathbf{W}^\dagger(x) = \begin{pmatrix} E - V(x) + \sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z & i\hbar v_F \eta k_y \\ -i\hbar v_F \eta k_y & E - V(x) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z) \end{pmatrix} = \mathbf{W}(x), \quad (3.25)$$

siendo una matriz hermiteana.

3.1.3. TMD's

En el caso de los dicalcogenuros, el hamiltoniano está dado por (1.20), encontremos los coeficientes de la ecuación matricial de Sturm-Liouville:

$$\begin{aligned}
E \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} &= i\hbar v_F \left[\eta_z \frac{d}{dx} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + ik_y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} + \Delta_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} \\
&+ \left[\Gamma_{SO} \eta_z \sigma_z - \Gamma_{SO} \eta_z \sigma_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} + V(x) \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix}, \tag{3.26}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= i\hbar v_F \left[\eta_z \frac{d}{dx} \begin{pmatrix} F_D \\ F_U \end{pmatrix} + ik_y \begin{pmatrix} -iF_D \\ iF_U \end{pmatrix} \right] + \Delta_z \begin{pmatrix} F_U \\ -F_D \end{pmatrix} \\
&+ \Gamma_{SO} \eta_z \sigma_z \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} - \Gamma_{SO} \eta_z \sigma_z \begin{pmatrix} F_U \\ -F_D \end{pmatrix} + V(x) \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix}, \tag{3.27}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= i\hbar v_F \begin{pmatrix} \eta_z \frac{dF_D}{dx} + k_y F_D \\ \eta_z \frac{dF_U}{dx} - k_y F_U \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta_z F_U \\ -\Delta_z F_D \end{pmatrix} + \Gamma_{SO} \eta_z \sigma_z \begin{pmatrix} F_U - F_U \\ F_D + F_D \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V(x) F_U \\ V(x) F_D \end{pmatrix}. \tag{3.28}
\end{aligned}$$

Por lo que tenemos:

$$EF_U = i\hbar v_F \left(\eta_z \frac{dF_D}{dx} + k_y F_D \right) + \Delta_z F_U + V(x) F_U, \tag{3.29}$$

$$EF_D = i\hbar v_F \left(\eta_z \frac{dF_U}{dx} - k_y F_U \right) - \Delta_z F_D + 2\Gamma_{SO} \eta_z \sigma_z F_D + V(x) F_D. \tag{3.30}$$

En su forma matricial.

$$\begin{pmatrix} 0 & i\hbar v_F \eta_z \\ i\hbar v_F \eta_z & 0 \end{pmatrix} \frac{d}{dx} \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta_z + V(x) - E & i\hbar v_F k_y \\ -i\hbar v_F k_y & -\Delta_z + 2\Gamma_{SO} \eta_z \sigma_z + V(x) - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} = 0. \tag{3.31}$$

De tal manera que los coeficientes para la forma de Sturm-Liouville son:

$$\mathbf{B}(x) = 0, \quad (3.32)$$

$$\mathbf{Y}(x) + \mathbf{P}(x) = i\hbar v_F \eta_z \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.33)$$

$$\mathbf{W}(x) = \begin{pmatrix} \Delta_z + V(x) - E & i\hbar v_F k_y \\ -i\hbar v_F k_y & -\Delta_z + 2\Gamma_{SO} \eta_z \sigma_z + V(x) - E \end{pmatrix}. \quad (3.34)$$

Para comprobar su hermiticidad.

$$\mathbf{Y}^\dagger(x) + \mathbf{P}^\dagger(x) = -i\hbar v_F \eta_z \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = -(\mathbf{Y}(x) + \mathbf{P}(x)), \quad (3.35)$$

donde podemos ver que es anti-hermiteana.

$$\mathbf{W}^\dagger(x) = \begin{pmatrix} \Delta_z + V(x) - E & i\hbar v_F k_y \\ -i\hbar v_F k_y & -\Delta_z + 2\Gamma_{SO} \eta_z \sigma_z + V(x) - E \end{pmatrix} = \mathbf{W}(x), \quad (3.36)$$

donde podemos ver que es hermiteana.

3.2. Matriz de transferencia

Ahora encontremos las matrices de transferencia para nuestros materiales bidimensionales, para ello comencemos con encontrar las soluciones linealmente independientes.

3.2.1. Grafeno

Teniendo los coeficientes de la ecuación de Sturm-Liouville, sustituyendo en la ecuación (2.29) cuando $V(x) = V_0$.

$$-q_x^2 (\hbar^2 v_F^2) + iq_x (-\hbar^2 v_F^2 k_y + \hbar^2 v_F^2 k_y) + [(E - V_0)^2 - \hbar^2 v_F^2 k_y^2] = 0,$$

$$q_x^2 = \frac{(E - V_0)^2 - (\hbar v_F k_y)^2}{(\hbar v_F)^2},$$

$$q_x = \pm \frac{\sqrt{(E - V_0)^2 - (\hbar v_F k_y)^2}}{\hbar v_F}. \quad (3.37)$$

De la misma manera podemos escribir los demás vectores de onda.

$$q_x^2 + q_y^2 = q^2,$$

$$q = \frac{E - V_0}{\hbar v_F},$$

$$k = \frac{E}{\hbar v_F},$$

$$k_x = \frac{1}{\hbar v_F} \sqrt{E^2 - (\hbar v_F k_y)^2}.$$

Reutilizando la expresión (2.25).

$$\left[\begin{pmatrix} 0 & q_x \hbar v_F \\ q_x \hbar v_F & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} E - V_0 & i \hbar v_F k_y \\ -i \hbar v_F k_y & E - V_0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} = 0. \quad (3.38)$$

Separando las expresiones,

$$(E - V_0)F_U + \hbar v_F(q_x + ik_y)F_D = 0, \quad (3.39)$$

$$\hbar v_F(q_x - ik_y)F_U + (E - V_0)F_D = 0. \quad (3.40)$$

Tomando $F_U = 1$ y resolviendo la ecuación (3.42) para F_D ,

$$F_D = \frac{\hbar v_F(-q_x + ik_y)}{E - V_0}. \quad (3.41)$$

Tomando en cuenta que q_x puede tomar los dos signos como se escribe en la ecuación (3.37).

$$F = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\hbar v_F(\pm q_x + ik_y)}{E - V_0} \end{pmatrix} e^{\pm iq_x x} = \begin{pmatrix} F_1(x) \\ F_2(x) \end{pmatrix}. \quad (3.42)$$

Estas son las soluciones linealmente independientes para el caso del grafeno, para encontrar la matriz de transferencia, retomemos la expresión (2.21),

$$M(x, x_0) = \begin{pmatrix} F_1(x) & F_2(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_1(x_0) & F_2(x_0) \end{pmatrix}^{-1}. \quad (3.43)$$

Al sustituir las soluciones linealmente independientes en el caso del grafeno.

$$M(x, x_0) = \begin{pmatrix} \cos [q_x(x - x_0)] + \frac{q_y}{q_x} \sin [q_x(x - x_0)] & i \left[\frac{E - V_0}{\hbar v_F q_x} \right] \sin [q_x(x - x_0)] \\ i \left[\frac{E - V_0}{\hbar v_F q_x} \right] \sin [q_x(x - x_0)] & \cos [q_x(x - x_0)] - \frac{q_y}{q_x} \sin [q_x(x - x_0)] \end{pmatrix}. \quad (3.44)$$

En esta expresión para M pueden comprobarse ciertas propiedades:

$$\bullet M(x, x_0)M(x_0, x) = I. \quad (3.45)$$

$$\bullet \det M(x, x_0) = 1. \quad (3.46)$$

• Los elementos en la diagonal son reales, y fuera de ella son imaginarios puros. Aunque estas propiedades fueron para un caso específico, se pueden generalizar ya que al tomar un potencial arbitrario, se puede describir dicho potencial como una secuencia de este potencial, por lo que dichas propiedades se mantienen en la secuencia.

3.2.2. Siliceno

Teniendo los coeficientes de la ecuación matricial de Sturm-Liouville, sustituimos los elementos en la expresión (2.25),

$$-q_x^2(\hbar^2 v_F^2) + i q_x [\hbar v_F (i \hbar v_F \eta) + \hbar v_F (-i \hbar v_F \eta)] + [(E - V_0)^2 - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)^2 - (\hbar v_F k_y)^2] = 0. \quad (3.47)$$

$$q_x = \pm \frac{\sqrt{(E - V_0)^2 - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)^2 - (\hbar v_F k_y)^2}}{\hbar v_F}. \quad (3.48)$$

Los demás vectores de onda en el caso del siliceno son:

$$\begin{aligned} k^2 &= \frac{1}{\hbar^2 v_F^2} [E^2 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2], \\ q^2 &= \frac{1}{\hbar^2 v_F^2} [(E - V_0)^2 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2], \\ k_x &= \frac{1}{\hbar v_F} \sqrt{E^2 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2}. \end{aligned}$$

Retomando la expresión (2.25).

$$(iq_x \mathbf{C} + \mathbf{W})\mathcal{F} = 0, \quad (3.49)$$

$$\left[\begin{pmatrix} 0 & \hbar v_F q_x \\ \hbar v_F q_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} E - V_0 + \sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z & i\hbar v_F \eta k_y \\ -i\hbar v_F \eta k_y & E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z) \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} = 0. \quad (3.50)$$

Lo que nos lleva a 2 ecuaciones.

$$[E - V_0 + \sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z] F_U + \hbar v_F (q_x + i\eta k_y) F_D = 0, \quad (3.51)$$

$$\hbar v_F (q_x - i\eta k_y) F_U + [E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)] F_D = 0. \quad (3.52)$$

Despejando F_D de la ecuación (3.54) y tomando a $F_U = 1$,

$$F_D = \frac{\hbar v_F (-q_x + i\eta k_y)}{E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)}. \quad (3.53)$$

Recordando que q_x puede tomar valores positivos y negativos.

$$F(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\hbar v_F (\pm q_x + i\eta k_y)}{E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix} e^{\pm i q_x x}. \quad (3.54)$$

Para encontrar su matriz de transferencia tenemos que:

$$M(x, x_0) = \begin{pmatrix} F_1(x) & F_2(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_1(x_0) & F_2(x_0) \end{pmatrix}^{-1}. \quad (3.55)$$

Por lo que al sustituir la expresión (3.54),

$$M(x, x_0) = \begin{pmatrix} e^{iq_x x} & e^{-iq_x x} \\ \frac{\hbar v_F(q_x + i\eta k_y)}{E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} e^{iq_x x} & \frac{-\hbar v_F(q_x - i\eta k_y)}{E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} e^{-iq_x x} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e^{iq_x x_0} & e^{-iq_x x_0} \\ \frac{\hbar v_F(q_x + i\eta k_y)}{E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} e^{iq_x x_0} & \frac{-\hbar v_F(q_x - i\eta k_y)}{E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} e^{-iq_x x_0} \end{pmatrix}^{-1}, \quad (3.56)$$

$$M(x, x_0) = -\frac{E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)}{2\hbar v_F q_x} \begin{pmatrix} e^{iq_x x} & e^{-iq_x x} \\ \frac{\hbar v_F(q_x + i\eta k_y)}{E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} e^{iq_x x} & \frac{-\hbar v_F(q_x - i\eta k_y)}{E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} e^{-iq_x x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{\hbar v_F(q_x - i\eta k_y)}{E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} e^{-iq_x x_0} & -e^{-iq_x x_0} \\ -\frac{\hbar v_F(q_x + i\eta k_y)}{E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} e^{iq_x x_0} & e^{iq_x x_0} \end{pmatrix} \quad (3.57)$$

Al hacer las operaciones necesarias:

$$M(x, x_0) = \frac{1}{q_x} \begin{pmatrix} q_x \cos q_x(x - x_0) + \eta k_y \sin q_x(x - x_0) & i \frac{[E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)]}{\hbar v_F} \sin q_x(x - x_0) \\ i \frac{\hbar v_F(q_x^2 + k_y^2)}{E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \sin q_x(x - x_0) & q_x \cos q_x(x - x_0) - \eta k_y \sin q_x(x - x_0) \end{pmatrix}. \quad (3.58)$$

Tomando en cuenta la conservación de momento en y , $q_y = k_y$ y simplificando q^2 .

$$M(x, x_0) = \begin{pmatrix} \cos q_x(x - x_0) + \frac{\eta q_y}{q_x} \sin q_x(x - x_0) & i \left[\frac{E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)}{\hbar v_F q_x} \right] \sin q_x(x - x_0) \\ i \left[\frac{E - V_0 + (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)}{\hbar v_F q_x} \right] \sin q_x(x - x_0) & \cos q_x(x - x_0) - \frac{\eta q_y}{q_x} \sin q_x(x - x_0) \end{pmatrix}. \quad (3.59)$$

Es fácil observar las similitudes que tenemos con la matriz de transferencia del grafeno, también podemos ver que esta matriz tiene las mismas 3 propiedades enumeradas en el caso del grafeno.

3.2.3. TMDs

Retomando la ecuación (2.29) y haciendo lo propio como en los casos anteriores:

$$\begin{aligned}
 q_x &= \\
 &\pm \frac{\sqrt{(E - V_0)(E - V_0 - \sigma\eta\Gamma_{SO}) - \sigma\eta\Gamma_{SO}(E - V_0 - \Delta_z) + \Delta_z(\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z) - (\hbar v_F k_y)^2}}{\hbar v_F}. \\
 &= \pm \frac{\sqrt{(E - V_0 - \sigma\eta\Gamma_{SO})^2 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2 - (\hbar v_F k_y)^2}}{\hbar v_F}.
 \end{aligned}$$

En este caso los demás vectores de onda, están dados por:

$$\begin{aligned}
 k^2 &= \frac{1}{\hbar^2 v_F^2} [(E - \sigma\eta\Gamma_{SO})^2 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2], \\
 q^2 &= \frac{1}{\hbar^2 v_F^2} [(E - V_0 - \sigma\eta\Gamma_{SO})^2 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2], \\
 k_x &= \frac{1}{\hbar v_F} \sqrt{(E - \sigma\eta\Gamma_{SO})^2 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2 - (\hbar v_F k_y)^2}.
 \end{aligned}$$

Retomando la ecuación (2.25),

$$\left[\begin{pmatrix} 0 & \eta\hbar v_F q_x \\ \eta\hbar v_F q_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} (E - V_0) - \Delta_z & i\hbar v_F k_y \\ -i\hbar v_F k_y & (E - V_0) + \Delta_z - 2\sigma\eta\Gamma_{SO} \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} F_U \\ F_D \end{pmatrix} = 0. \quad (3.60)$$

Separando las expresiones,

$$(E - V_0 - \Delta_z)F_U + \hbar v_F(\eta q_x + i k_y)F_D = 0, \quad (3.61)$$

$$\hbar v_F(\eta q_x - i k_y)F_U + (E - V_0 - 2\sigma\eta\Gamma_{SO} + \Delta_z)F_D = 0. \quad (3.62)$$

Cuando $F_U = 1$ nos lleva a la solución.

$$F_D = \frac{\hbar v_F(-\eta q_x + i k_y)}{(E - V_0 - \sigma\eta\Gamma_{SO}) - \sigma\eta\Gamma_{SO} + \Delta_z}. \quad (3.63)$$

Las soluciones linealmente independientes son.

$$F(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\hbar v_F(\pm \eta q_x + i k_y)}{(E - V_0 - \sigma \eta \Gamma_{SO}) - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix} e^{\pm i q_x x}. \quad (3.64)$$

Para la matriz de transferencia.

$$M(x, x_0) = \begin{pmatrix} e^{i q_x x} & e^{-i q_x x} \\ \frac{\hbar v_F(\eta q_x + i k_y)}{(E - V_0 - \sigma \eta \Gamma_{SO}) - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)} e^{i q_x x} & -\frac{\hbar v_F(\eta q_x - i k_y)}{(E - V_0 - \sigma \eta \Gamma_{SO}) - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)} e^{-i q_x x} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e^{i q_x x_0} & e^{-i q_x x_0} \\ \frac{\hbar v_F(\eta q_x + i k_y)}{(E - V_0 - \sigma \eta \Gamma_{SO}) - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)} e^{i q_x x_0} & -\frac{\hbar v_F(\eta q_x - i k_y)}{(E - V_0 - \sigma \eta \Gamma_{SO}) - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)} e^{-i q_x x_0} \end{pmatrix}^{-1}. \quad (3.65)$$

Realizando las operaciones necesarias:

$$M(x, x_0) = \begin{pmatrix} \cos q_x(x - x_0) + \frac{\eta q_y}{q_x} \sin q_x(x - x_0) & i \left[\frac{(E - V_0 - \sigma \eta \Gamma_{SO}) - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)}{\hbar v_F \eta q_x} \right] \sin q_x(x - x_0) \\ i \left[\frac{\hbar v_F \eta q^2}{[(E - V_0 - \sigma \eta \Gamma_{SO}) - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)] q_x} \right] \sin q_x(x - x_0) & \cos q_x(x - x_0) - \frac{\eta q_y}{q_x} \sin q_x(x - x_0) \end{pmatrix}. \quad (3.66)$$

Utilizando la relación de dispersión para llevarla a la misma forma de las expresiones del grafeno y siliceno, tenemos que:

$$M(x, x_0) = \begin{pmatrix} \cos q_x(x - x_0) + \frac{\eta q_y}{q_x} \sin q_x(x - x_0) & i \left[\frac{(E - V_0 - \sigma \eta \Gamma_{SO}) - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)}{\hbar v_F \eta q_x} \right] \sin q_x(x - x_0) \\ i \left[\frac{(E - V_0 - \sigma \eta \Gamma_{SO}) + (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)}{\hbar v_F \eta q_x} \right] \sin q_x(x - x_0) & \cos q_x(x - x_0) - \frac{\eta q_y}{q_x} \sin q_x(x - x_0) \end{pmatrix}. \quad (3.67)$$

Donde podemos ver que la forma es idéntica a las anteriores y con un sólo juego en los valles, podemos recuperar a los otros materiales.

3.3. Estados acotados

Los estados acotados son aquellos donde la partícula se encuentra confinada, por lo que hay una probabilidad de 1 que se encuentre en esta región. Para encontrar una expresión para los estados acotados, tomemos un potencial como el descrito en la Fig. 3.1 en cada uno de los materiales de nuestro trabajo (grafeno, siliceno y TMD's). En la figura podemos apreciar un potencial arbitrario unidimensional $V(x)$ con un ancho D y un vector de onda q_x , en las zonas de los extremos podemos ver V_1, V_2, k_{x1} y k_{x2} que son los potenciales y los vectores de onda respectivamente. Podemos observar como llega una onda a la perturbación generando estados acotados de huecos, además, en (a), se presenta un estado de transmisión perfecta para huecos cuando $T(E_t, k_y) = 1$. En (b) ese estado se convierte en un estado acotado para huecos, podemos observar que si D aumenta, se atrapan mas estados.

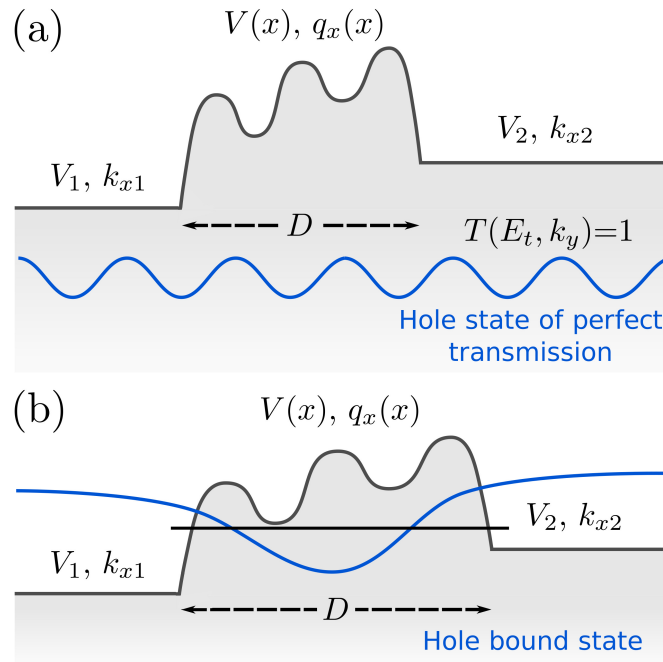


Figura 3.1: Potencial unidimensional $V(x)$ en la región D , acotada por los potenciales V_1 y V_2 constantes. $q_x(x)$ es el vector de onda en la perturbación arbitraria y k_{x1} y k_{x2} los vectores de onda de las regiones de los extremos.

3.3.1. Grafeno

Para este potencial, podemos escribir las soluciones en las diferentes regiones de la siguiente manera:

$$F(x) = \begin{cases} A \begin{pmatrix} 1 \\ s_1 \frac{\hbar v_F(k_{x1} + ik_y)}{E - V_1} \end{pmatrix} e^{ik_1 x} + B \begin{pmatrix} 1 \\ -s_1 \frac{\hbar v_F(k_{x1} - ik_y)}{E - V_1} \end{pmatrix} e^{-ik_1 x}, & \text{para } x \leq x_1, \\ M(x, x_1)F(x_1), & \text{para } x_1 \leq x \leq x_2, \\ C \begin{pmatrix} 1 \\ s_2 \frac{\hbar v_F(k_{x2} + ik_y)}{E - V_2} \end{pmatrix} e^{ik_2 x} + D \begin{pmatrix} 1 \\ -s_2 \frac{\hbar v_F(k_{x2} - ik_y)}{E - V_2} \end{pmatrix} e^{-ik_2 x}, & \text{para } x \geq x_2, \end{cases} \quad (3.68)$$

donde x_1 y x_2 son las posiciones donde comienza la perturbación, por lo que $x_2 - x_1 = D$, s_1 y s_2 son los signos en las dos regiones, sgn es la función signo:

$$k_{x1} = \sqrt{\left(\frac{E - V_1}{\hbar v_F}\right)^2 - k_y^2}, \quad (3.69)$$

$$k_{x2} = \sqrt{\left(\frac{E - V_2}{\hbar v_F}\right)^2 - k_y^2}, \quad (3.70)$$

$$s_1 = \text{sgn}(E - V_1), \quad (3.71)$$

$$s_2 = \text{sgn}(E - V_2). \quad (3.72)$$

Aquí se considera que $k_y = q_y$, es decir, que el momento se conserva la dirección en el eje y . Para la continuidad de $F(x)$ en el punto x_1 y x_2 , se obtienen un par de ecuaciones para los coeficientes A, B, C y D. Para los estados acotados, se requiere que $A = D = 0$ para que sea de cuadrado integrable. Para verificar la continuidad de la onda, se tienen que resolver las siguientes ecuaciones simultáneas.

$$A \begin{pmatrix} e^{ik_1 x_1} \\ s_1 \frac{\hbar v_F(k_x + ik_y)}{E - V_1} e^{ik_1 x_1} \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} e^{-ik_1 x_1} \\ -s_1 \frac{\hbar v_F(k_{x1} - ik_y)}{E - V_1} e^{-ik_1 x_1} \end{pmatrix} = F(x_1+), \quad (3.73)$$

$$M(x_2-, x_1+)F(x_1+) = C \begin{pmatrix} e^{ik_2x_2} \\ s_2 \frac{\hbar v_F(k_{x2}+ik_y)}{E-V_2} e^{ik_{x2}x_2} \end{pmatrix} + D \begin{pmatrix} e^{-ik_2x_2} \\ -s_2 \frac{\hbar v_F(k_{x2}-ik_y)}{E-V_2} e^{-ik_2x_2} \end{pmatrix}. \quad (3.74)$$

Combinando estas 2 expresiones:

$$M(x_2-, x_1+) \left[A \begin{pmatrix} e^{ik_1x_1} \\ s_1 \frac{\hbar v_F(k_x+ik_y)}{E-V_1} e^{ik_1x_1} \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} e^{-ik_1x_1} \\ -s_1 \frac{\hbar v_F(k_{x1}-ik_y)}{E-V_1} e^{-ik_1x_1} \end{pmatrix} \right] = C \begin{pmatrix} e^{ik_2x_2} \\ s_2 \frac{\hbar v_F(k_{x2}+ik_y)}{E-V_2} e^{ik_{x2}x_2} \end{pmatrix} + D \begin{pmatrix} e^{-ik_2x_2} \\ -s_2 \frac{\hbar v_F(k_{x2}-ik_y)}{E-V_2} e^{-ik_2x_2} \end{pmatrix}. \quad (3.75)$$

Si se cambian los argumentos por el ancho de la barrera por $(x - x_1)$ y $(x - x_2)$ y se sustituye $A = D = 0$ y además se evalúan en el empalme, se tiene que:

$$M(x_2-, x_1+)B \begin{pmatrix} 1 \\ -s_1 \frac{\hbar v_F(k_{x1}-ik_y)}{E-V_1} \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} 1 \\ s_2 \frac{\hbar v_F(k_{x2}+ik_y)}{E-V_2} \end{pmatrix}. \quad (3.76)$$

Realizando la multiplicación se obtiene la siguiente expresión:

$$B \begin{pmatrix} M_{11} - M_{12}s_1 \frac{\hbar v_F(k_{x1}-ik_y)}{E-V_1} \\ M_{21} - M_{22}s_1 \frac{\hbar v_F(k_{x1}-ik_y)}{E-V_1} \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} 1 \\ s_2 \frac{\hbar v_F(k_{x2}+ik_y)}{E-V_2} \end{pmatrix}, \quad (3.77)$$

Lo que nos lleva a resolver por el determinante con la siguiente expresión.

$$\begin{vmatrix} M_{11} - M_{12}s_1 \frac{\hbar v_F(k_{x1}-ik_y)}{E-V_1} & 1 \\ M_{21} - M_{22}s_1 \frac{\hbar v_F(k_{x1}-ik_y)}{E-V_1} & s_2 \frac{\hbar v_F(k_{x2}+ik_y)}{E-V_2} \end{vmatrix} = 0. \quad (3.78)$$

Al realizar las operaciones matemáticas pertinentes, se obtiene la siguiente expresión para los estados acotados:

$$M_{11}\hbar v_F(k_{x2} + ik_y)(E - V_1) - M_{12}\hbar^2 v_F^2(k_{x1} - ik_y)(k_{x2} + ik_y) \quad (3.79)$$

$$+ M_{22}\hbar v_F(k_{x1} - ik_y)(E - V_2) - M_{21}(E - V_1)(E - V_2) = 0. \quad (3.80)$$

En el caso mostrado, en los cuales las regiones de los extremos son iguales $V_1 = V_2 = V$ y $k_{x1} = k_{x2} = k_x$.

$$\hbar v_F(E - V)[(M_{11} + M_{22})k_x + i(M_{11} - M_{22})k_y] - M_{12}\hbar^2 v_F^2 k^2 - M_{21}(E - V)^2 = 0, \quad (3.81)$$

$$(M_{11} + M_{22})k_x + i(M_{11} - M_{22})k_y - \frac{E - V}{\hbar v_F}(M_{12} + M_{21}) = 0. \quad (3.82)$$

donde las M son los elementos de la matriz de transferencia.

3.3.2. Siliceno

En el caso del siliceno, para encontrar los estados acotados, tenemos que tener en cuenta el cambio del espín, esto se debe a que el gap varia si el índice de valle y el espín son contrarios, tomemos los potenciales mostrados en la Fig. 3.2. Se puede observar que cuando tenemos un cambio en el espín el gap aumenta. Como en el caso del grafeno, para encontrar los estados acotados,

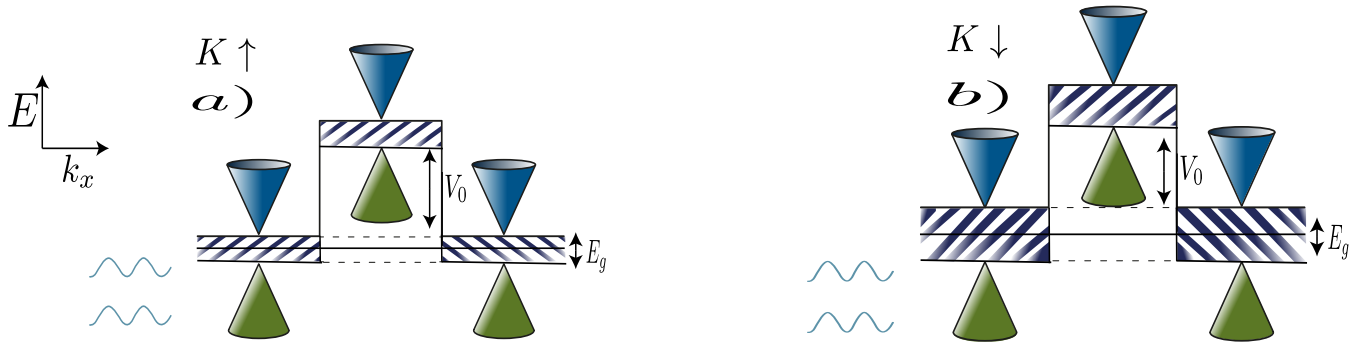


Figura 3.2: Barrera de potencial electrostática en el caso del siliceno para el valle K, V_0 es el alto de la barrera, E_g es el band gap, k_x es el vector de onda afuera de la barrera. En a) espín up y b) espín down. Se puede apreciar la diferencia provocada por el band gap en las diferentes componentes de espín.

tenemos que:

$$A \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\hbar v_F(k_{x1} + \eta i k_y)}{E - V_1 - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix} e^{i(k_{x1} + k_y y_1)} + B \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{-\hbar v_F(k_{x1} - \eta i k_y)}{E - V_1 - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix} e^{-i(k_{x1} + k_y y_1)} = F(x_{1+}), \quad (3.83)$$

$$M(x_{2-}, x_{1+})F(x_{1+}) = C \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{i\hbar v_F(k_{x2} + \eta i k_y)}{E - V_2 - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix} e^{i(k_{x2} + k_y y_2)} + D \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{-\hbar v_F(k_{x2} - \eta i k_y)}{E - V_2 - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix} e^{-i(k_{x2} + k_y y_2)}. \quad (3.84)$$

De igual manera como en el caso del grafeno con $A = D = 0$ para que la función de onda sea de cuadrado integrable.

$$M(x_{2-}, x_{1+})B \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{-\hbar v_F(k_{x1} - \eta i k_y)}{E - V_1 - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{i\hbar v_F(k_{x2} + \eta i k_y)}{E - V_2 - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix}. \quad (3.85)$$

$$\begin{pmatrix} M_{11} + M_{12} \frac{-\hbar v_F(k_{x1} - \eta i k_y)}{E - V_1 - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)} \\ M_{21} + M_{22} \frac{-\hbar v_F(k_{x1} - \eta i k_y)}{E - V_1 - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\hbar v_F(k_{x2} + \eta i k_y)}{E - V_2 - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix}. \quad (3.86)$$

$$\begin{pmatrix} M_{11} + M_{12} \frac{-\hbar v_F(k_{x1} - \eta i k_y)}{E - V_1 - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)} & 1 \\ M_{21} + M_{22} \frac{-\hbar v_F(k_{x1} + \eta i k_y)}{E - V_1 - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)} & \frac{\hbar v_F(k_{x2} + \eta i k_y)}{E - V_2 - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix} = 0. \quad (3.87)$$

Resolviendo este determinante, nuestra expresión para estados acotados en siliceno es:

$$\begin{aligned} & M_{11} \hbar v_F(k_{x2} + i \eta k_y)(E - V_2 - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)) - M_{12} \hbar^2 v_F^2(k_{x2} + i \eta k_y)(k_{x1} - i \eta k_y) \\ & + M_{22} \hbar v_F(k_{x1} - i \eta k_y)(E - V_2 - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)) \\ & - M_{21}(E - V_1 - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z))(E - V_2 - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)) = 0. \end{aligned} \quad (3.88)$$

De igual manera como en el grafeno, tomando el caso donde $V_1 = V_2 = V$ y $k_{x1} = k_{x2} = k_x$.

$$\begin{aligned}
& \hbar v_F (E - V - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)) [(M_{11} + M_{22})k_x + i\eta(M_{11} - M_{22})k_y] \\
& - M_{12}(\hbar v_F k)^2 - M_{21}(E - V - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z))^2 = 0, \\
& (M_{11} + M_{22})k_x + i\eta(M_{11} - M_{22})k_y - \frac{E - V}{\hbar v_F} (M_{12} + M_{21}) - (M_{12} - M_{21})(\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z) = 0.
\end{aligned} \tag{3.89}$$

Retomando la expresión del grafeno para fines comparativos:

$$(M_{11} + M_{22})k_x + i(M_{11} - M_{22})k_y - \frac{E - V_0}{\hbar v_F} (M_{12} + M_{21}) = 0. \tag{3.90}$$

Donde nos podemos percatar que de la expresión obtenida para el siliceno, es posible llegar a la del grafeno, lo único que debemos es hacer cero las cantidades que no están presentes en el grafeno.

3.3.3. TMDs

Para los estados acotados en los TMDs, aunque no son simétricos como en el caso del siliceno, el valor del gap intrínseco es muy grande en comparación a los otros parámetros que lo pueden aumentar o disminuir, por lo que podemos tomar el potencial de la Figura 3.3. En este caso, de la misma manera como en los casos anteriores, resolvamos las ecuaciones en la interfaz utilizando la matriz de transferencia:

$$A \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\hbar v_F(\eta k_{x1} + i k_y)}{E - V_1 - \sigma\eta\Gamma_{SO} - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix} e^{i(k_{x1} + k_y y_1)} + B \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{-\hbar v_F(\eta k_{x1} - i k_y)}{E - V_1 - \sigma\eta\Gamma_{SO} - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix} e^{-i(k_{x1} + k_y y_1)} = F(x_1+), \tag{3.91}$$

$$\begin{aligned}
& M(x_2-, x_1+) F(x_1+) = \\
& C \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{i\hbar v_F(\eta k_{x2} + i k_y)}{E - V_2 - \sigma\eta\Gamma_{SO} - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix} e^{i(k_{x2} + k_y y_2)} + D \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{-\hbar v_F(\eta k_{x2} - i k_y)}{E - V_2 - \sigma\eta\Gamma_{SO} - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix} e^{-i(k_{x2} + k_y y_2)}.
\end{aligned} \tag{3.92}$$

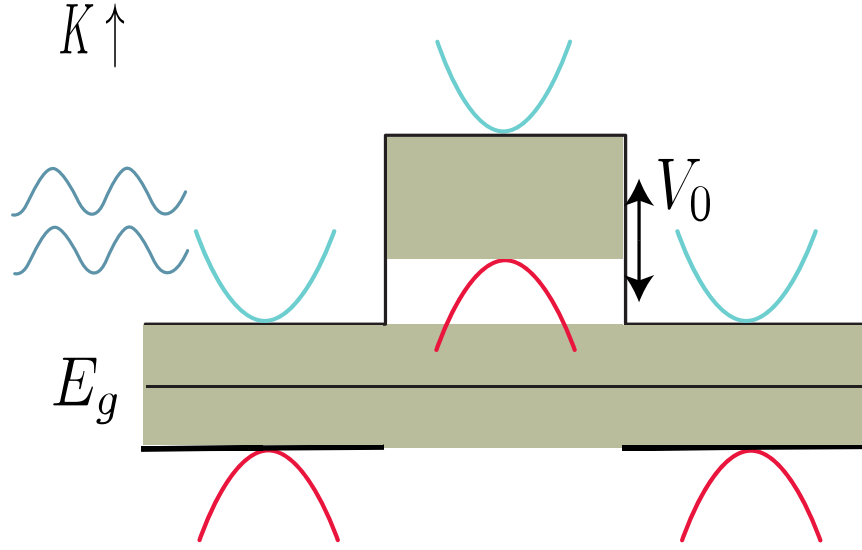


Figura 3.3: Barrera de potencial electrostático en MoS₂ para el valle K espín up ($K \uparrow$). V_0 es la altura de la barrera, E_g es el band gap. A diferencia de los materiales anteriores, en este caso, tenemos parábolas en vez de los conos.

Con $A = D = 0$.

$$M(x_2-, x_1+)B \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{-\hbar v_F(\eta k_{x1} - k_y)}{E - V_1 - \sigma\eta\Gamma_{SO} - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\hbar v_F(\eta k_{x2} + ik_y)}{E - V_2 - \sigma\eta\Gamma_{SO} - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix}. \quad (3.93)$$

$$\begin{pmatrix} M_{11} + M_{12} \frac{-\hbar v_F(\eta k_{x1} - ik_y)}{E - V_1 - \sigma\eta\Gamma_{SO} - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \\ M_{21} + M_{22} \frac{-\hbar v_F(\eta k_{x1} - ik_y)}{E - V_1 - \sigma\eta\Gamma_{SO} - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\hbar v_F(\eta k_{x2} + ik_y)}{E - V_2 - \sigma\eta\Gamma_{SO} - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix}. \quad (3.94)$$

$$\begin{pmatrix} M_{11} + M_{12} \frac{-\hbar v_F(\eta k_{x1} - ik_y)}{E - V_1 - \sigma\eta\Gamma_{SO} - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} & 1 \\ M_{21} + M_{22} \frac{-\hbar v_F(\eta k_{x1} - ik_y)}{E - V_1 - \sigma\eta\Gamma_{SO} - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} & \frac{\hbar v_F(\eta k_{x2} + ik_y)}{E - V_2 - \sigma\eta\Gamma_{SO} - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix} = 0. \quad (3.95)$$

Al resolver por determinante, tenemos nuestra expresión para estados acotados:

$$\begin{aligned}
& M_{11}\hbar v_F(\eta k_{x2} + ik_y)(E - V_1 - \sigma\eta\Gamma_{SO} - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)) \\
& - M_{12}(\hbar v_F)^2(\eta k_{x1} + ik_y)(\eta k_{x2} - ik_y) \\
& + M_{22}\hbar v_F(\eta k_{x1} - ik_y)(E - V_2 - \sigma\eta\Gamma_{SO} - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)) \\
& - M_{21}(E - V_1 - \sigma\eta\Gamma_{SO} - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z))(E - V_2 - \sigma\eta\Gamma_{SO} - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)) = 0.
\end{aligned} \tag{3.96}$$

Y en el caso particular de que $V_1 = V_2 = V$ y $k_{x1} = k_{x2} = k_x$.

$$\begin{aligned}
& \hbar v_F[E - V - \sigma\eta\Gamma_{SO} - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)][(M_{11} + M_{22})\eta k_x + i(M_{11} - M_{22})k_y] \\
& - M_{12}(\hbar v_F k)^2 - M_{21}(E - V - \sigma\eta\Gamma_{SO} - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z))^2 = 0,
\end{aligned} \tag{3.97}$$

$$\begin{aligned}
& (M_{11} + M_{22})k_x + i\eta(M_{11} - M_{22})k_y - \frac{E - V - \sigma\eta\Gamma_{SO}}{\hbar v_F}(M_{12} + M_{21}) \\
& - \frac{\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z}{\hbar v_F}(M_{12} - M_{21}) = 0.
\end{aligned} \tag{3.98}$$

Expresión que al compararla con las expresiones para el grafeno y el siliceno, es fácil ver que se pueden recuperar dichas expresiones a partir de esta misma.

3.4. Probabilidad de transmisión

Para calcular la probabilidad de transmisión, partimos de la definición

$$T = \left| \frac{j_x^{out}}{j_x^{in}} \right|, \tag{3.99}$$

donde j_x^{in} es la densidad de corriente de probabilidad de entrada y j_x^{out} es la densidad de corriente de probabilidad de salida a la perturbación, ambas en la dirección x . Por lo que tenemos que encontrar las expresiones para la densidad de entrada y de salida. En general, tenemos que:

$$\mathbf{j} = v_F \mathbf{F}^+ \boldsymbol{\sigma} \mathbf{F}. \quad (3.100)$$

En nuestro caso:

$$j_x = v_F \mathbf{F}^+ \sigma_x \mathbf{F}. \quad (3.101)$$

3.4.1. Grafeno

En el caso del grafeno, para calcular la probabilidad de transmisión, tenemos lo siguiente.

$$\mathbf{F}_{in} = A \begin{pmatrix} 1 \\ s_1 \frac{\hbar v_F (k_{x1} + ik_y)}{E - V_1} \end{pmatrix} e^{ik_{1x}x}, \quad (3.102)$$

$$j_x^{in} = v_F A^2 \begin{pmatrix} 1 & s_1 \frac{\hbar v_F (k_{x1} - ik_y)}{E - V_1} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ s_1 \frac{\hbar v_F (k_{x1} + ik_y)}{E - V_1} \end{pmatrix}, \quad (3.103)$$

$$j_x^{in} = v_F A^2 \begin{pmatrix} 1 & s_1 \frac{\hbar v_F (k_{x1} - ik_y)}{E - V_1} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_1 \frac{\hbar v_F (k_{x1} + ik_y)}{E - V_1} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.104)$$

$$j_x^{in} = \frac{2s_1 \hbar v_F^2 A^2 k_{x1}}{E - V_1}, \quad (3.105)$$

$$\mathbf{F}_{out} = C \begin{pmatrix} 1 \\ s_2 \frac{\hbar v_F (k_{x2} + ik_y)}{E - V_1} \end{pmatrix} e^{ik_{2x}x}. \quad (3.106)$$

$$j_x^{out} = v_F C^2 \begin{pmatrix} 1 & s_2 \frac{\hbar v_F (k_{x2} - ik_y)}{E - V_1} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ s_2 \frac{\hbar v_F (k_{x2} + ik_y)}{E - V_1} \end{pmatrix}, \quad (3.107)$$

$$j_x^{out} = v_F C^2 \begin{pmatrix} 1 & s_2 \frac{\hbar v_F (k_{x2} - ik_y)}{E - V_2} \\ s_2 \frac{\hbar v_F (k_{x2} + ik_y)}{E - V_2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_2 \frac{\hbar v_F (k_{x2} + ik_y)}{E - V_2} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.108)$$

$$j_x^{out} = \frac{2s_2 \hbar v_F^2 C^2 k_{x2}}{E - V_2}. \quad (3.109)$$

Sustituyendo (3.105) y (3.109) en (3.99) la expresión resultante es:

$$T = \frac{s_2 k_{x2} (E - V_1)}{s_1 k_{x1} (E - V_2)} \left| \frac{C}{A} \right|^2. \quad (3.110)$$

Para encontrar una expresión para este material, primero encontremos una solución para $\frac{C}{A}$.

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ s_1 \frac{\hbar v_F (k_{x1} + ik_y)}{E - V_1} & -s_1 \frac{\hbar v_F (k_{x1} - ik_y)}{E - V_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C e^{ik_2 D} \\ C s_2 \frac{\hbar v_F (k_{x2} + ik_y)}{E - V_2} e^{ik_2 D} \end{pmatrix}, \quad (3.111)$$

donde D es el ancho de la barrera; por lo que el problema a resolver se transforma en el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} A(M_{11} + M_{12} s_1 \frac{\hbar v_F (k_{x1} + ik_y)}{E - V_1}) + B(M_{11} - M_{12} s_1 \frac{\hbar v_F (k_{x1} - ik_y)}{E - V_1}) &= C e^{ik_2 D}, \\ A(M_{21} + M_{22} s_1 \frac{\hbar v_F (k_{x1} + ik_y)}{E - V_1}) + B(M_{21} - M_{22} s_1 \frac{\hbar v_F (k_{x1} - ik_y)}{E - V_1}) &= C s_2 \frac{\hbar v_F (k_{x2} + ik_y)}{E - V_2} e^{ik_2 D}. \end{aligned} \quad (3.112)$$

Después de un tratamiento matemático, se tiene que:

$$\frac{C}{A} = \frac{2s_1 k k_{x1} [M_{11} M_{22} - M_{12} M_{21}]}{M_{11} s_2 k (k_{x2} + ik_y) - M_{12} s_1 s_2 k_y (k_{x1} + k_{x2} + i(k_{x1} - k_{x2})) - M_{21} k^2 + M_{22} s_1 k (k_{x2} - ik_y)}. \quad (3.113)$$

Aquí podemos utilizar que el $\det [M(x, x_0)] = 1$,

$$\frac{C}{A} = \frac{2s_1 k k_{x1}}{M_{11} s_2 k (k_{x2} + ik_y) - M_{12} s_1 s_2 k_y (k_{x1} + k_{x2} + i(k_{x1} - k_{x2})) - M_{21} k^2 + M_{22} s_1 k (k_{x2} - ik_y)}. \quad (3.114)$$

por lo que la expresión para la probabilidad de transmisión es:

$$T = \frac{4s_2k^2k_{x1}k_{x2}}{s_1(E - V_2)} \frac{(E - V_1)}{|M_{11}s_2k(k_{x2} + ik_y) - M_{12}s_1s_2k_y(k_{x1} + k_{x2} + i(k_{x1} - k_{x2})) - M_{21}k^2 + M_{22}s_1k(k_{x2} - ik_y)|^2}. \quad (3.115)$$

En el caso particular de que los potenciales en los extremos son iguales $V_1 = V_2 = V$ y $k_{x1} = k_{x2} = k_x$.

$$T = \frac{4k_x^2}{|k_x(M_{11} + M_{22}) + ik_y(M_{11} - M_{22}) - k(M_{12} + M_{21})|^2}. \quad (3.116)$$

Acomodando los elementos reales de los imaginarios de la matriz en nuestra expresión para la transmisión:

$$T = \frac{1}{[\frac{1}{2}(M_{11} + M_{22})]^2 + [\frac{1}{2k_x}((M_{11} - M_{22})k_y - \frac{E-V}{\hbar v_F}(|M_{12}| + |M_{21}|))]^2}. \quad (3.117)$$

3.4.2. Siliceno

En el caso del siliceno, para su probabilidad de transmisión

$$T = \left| \frac{j_x^{out}}{j_x^{in}} \right|, \quad (3.118)$$

$$j_x = v_F \mathbf{F}^\dagger \sigma_x \mathbf{F}, \quad (3.119)$$

$$j_x^{in} = A^2 k_{x1} \frac{2v_F^2 \hbar}{E - V_1 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)}, \quad (3.120)$$

$$j_x^{out} = C^2 k_{x2} \frac{2v_F^2 \hbar}{E - V_2 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)}. \quad (3.121)$$

Sustituyendo en la probabilidad de transmisión:

$$T = \frac{k_{x2}}{k_{x1}} \frac{E - V_1 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)}{E - V_2 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \left| \frac{C}{A} \right|^2. \quad (3.122)$$

Para encontrar una expresión para la razón de C/A :

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{\hbar v_F(k_{x1} + \eta i k_y)}{E - V_1 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} & \frac{-\hbar v_F(k_{x1} - \eta i k_y)}{E - V_1 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\hbar v_F(k_{x2} + \eta i k_y)}{E - V_2 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \end{pmatrix} C e^{ik_2 d}, \quad (3.123)$$

$$A \left(M_{11} + M_{12} \frac{\hbar v_F(k_{x1} + \eta i k_y)}{E - V_1 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \right) + B \left(M_{11} - M_{12} \frac{\hbar v_F(k_{x1} - \eta i k_y)}{E - V_1 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \right) = C e^{ik_2 d}, \quad (3.124)$$

$$A \left(M_{21} + M_{22} \frac{\hbar v_F(k_{x1} + \eta i k_y)}{E - V_1 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \right) + B \left(M_{21} - M_{22} \frac{\hbar v_F(k_{x1} - \eta i k_y)}{E - V_1 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \right) = C e^{ik_2 d} \frac{\hbar v_F(k_{x2} + \eta i k_y)}{E - V_2 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)}. \quad (3.125)$$

Realizando el cociente de $\frac{C}{A}$.

$$T = \frac{4\hbar^2 v_F^2 k_{x1}^2 |\gamma_2|^2}{|\hbar v_F[(M_{11}k_{x2}\gamma_1 + M_{22}k_{x1}\gamma_2) + i\eta k_y(M_{11}\gamma_1 - M_{22}\gamma_2)] - M_{12}\hbar^2 v_F^2(k_{x1} - i\eta k_y)(k_{x2} + i\eta k_y) - M_{21}\gamma_1\gamma_2|^2}. \quad (3.126)$$

En este caso $\gamma_1 = E - V_1 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)$ y $\gamma_2 = E - V_2 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)$. En el caso de que $V_1 = V_2 = V$ y $k_{x1} = k_{x2} = k_x$.

$$T = \frac{4}{\left| [M_{11} + M_{22}] + i\eta [M_{11} - M_{22}] \frac{k_y}{k_x} - \frac{k^2}{k_x} M_{12} \frac{\hbar v_F}{E - V - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} - \frac{1}{k_x} M_{21} \frac{E - V - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)}{\hbar v_F} \right|^2}. \quad (3.127)$$

Separando la parte real e imaginaria de los elementos de la matriz en la expresión para probabilidad.

$$T = \frac{1}{\left[\frac{1}{2k_x}(M_{11} + M_{22}) \right]^2 + \left[\frac{1}{2k_x} \left(\eta k_y (M_{11} - M_{22}) - \frac{E-V}{\hbar v_F} (|M_{12}| + |M_{21}|) - \frac{\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z}{\hbar v_F} (|M_{12}| - |M_{21}|) \right) \right]^2}. \quad (3.128)$$

De igual manera como en el caso para los estados acotados, de la expresión encontrada para el siliceno, se puede recuperar la expresión para el grafeno.

3.4.3. TMDs

Para la probabilidad de transmisión en los TMDs. Tenemos que hacer los mismos cálculos que en los casos anteriores, lo que nos lleva a una expresión idéntica que para el siliceno, sólo cambiando lo que definimos como γ_1 y γ_2 .

$$T = \frac{4\hbar^2 v_F^2 k_{x1}^2 |\gamma_2|^2}{|\hbar v_F [(M_{11} k_{x2} \gamma_1 + M_{22} k_{x1} \gamma_2) + i\eta k_y (M_{11} \gamma_1 - M_{22} \gamma_2)] - M_{12} \hbar^2 v_F^2 (k_{x1} - i\eta k_y)(k_{x2} + i\eta k_y) - M_{21} \gamma_1 \gamma_2|^2}. \quad (3.129)$$

En este caso $\gamma_1 = E - V_1 - \sigma \eta \Gamma_{SO} - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)$ y $\gamma_2 = E - V_2 + \sigma \eta \Gamma_{SO} - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)$. Podemos ver que a partir de esta expresión podemos recuperar las expresiones tanto para el siliceno como para el grafeno, por lo que podríamos decir que son casos particulares de esta misma, además se puede observar que según el material que se quiera investigar, estos factores entran directamente a la expresión en la parte que afectan. En el caso de que los potenciales de las zonas semi infinitas sean iguales $V_1 = V_2 = V$ y $k_{x1} = k_{x2} = k_x$.

$$T = \frac{4}{\left| (M_{11} + M_{22})\eta + i(M_{11} - M_{22})\frac{k_y}{k_x} - \frac{\hbar v_F k^2}{k_x [(E - \sigma \eta \Gamma_{SO}) - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)]} M_{12} - \frac{(E - \sigma \eta \Gamma_{SO}) - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)}{\hbar v_F k_x} M_{21} \right|^2}. \quad (3.130)$$

Separando la parte real de la imaginaria.

$$T =$$

$$\frac{1}{\left[\frac{1}{2k_x}(M_{11} + M_{22}) \right]^2 + \left[\frac{1}{2k_x} \left(\eta k_y (M_{11} - M_{22}) - \frac{E-V-\sigma\eta\Gamma_{SO}}{\hbar v_F} (|M_{12}| + |M_{21}|) - \frac{\sigma\eta\Gamma_{SO}-\Delta_z}{\hbar v_F} (|M_{12}| - |M_{21}|) \right) \right]^2} \quad (3.131)$$

3.5. Estados acotados en general

De acuerdo con lo visto en cada uno de los materiales bidimensionales, podemos escribir de forma general la función de onda en las diferentes regiones de la siguiente manera:

$$F(x) = \begin{cases} A \begin{pmatrix} 1 \\ u_{1-} \end{pmatrix} e^{ik_1(x-x_1)} + B \begin{pmatrix} 1 \\ u_{1-} \end{pmatrix} e^{-ik_1(x-x_1)}, & \text{para } x \leq x_1, \\ M(x, x_1)F(x_1), & \text{para } x_1 \leq x \leq x_2, \\ C \begin{pmatrix} 1 \\ u_{2+} \end{pmatrix} e^{ik_2(x-x_2)} + D \begin{pmatrix} 1 \\ u_{2+} \end{pmatrix} e^{-ik_2(x-x_2)}, & \text{para } x \geq x_2. \end{cases} \quad (3.132)$$

Es importante remarcar, que para cada material, tanto el vector de onda como los coeficientes del espinor adoptar su forma particular. Para encontrar la expresión para estados acotados, debemos hacer los coeficientes $A = D = 0$, esto con la finalidad de tener una función de onda de cuadrado integrable. Al evaluar en las interfaces $x = x_1$ y $x = x_2$ e igualar las expresiones resultantes, tenemos que:

$$BM \begin{pmatrix} 1 \\ u_{1-} \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} 1 \\ u_{2+} \end{pmatrix}, \quad (3.133)$$

realizando las multiplicaciones con los elementos de la matriz de transferencia e igualando a cero

$$\begin{pmatrix} M_{11} + M_{12}u_{1-} & -1 \\ M_{21} + M_{22}u_{1-} & -u_{2+} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.134)$$

Para la solución no trivial, resolvamos el siguiente determinante.

$$\begin{vmatrix} M_{11} + M_{12}u_{1-} & -1 \\ M_{21} + M_{22}u_{1-} & -u_{2+} \end{vmatrix} = 0, \quad (3.135)$$

al resolver esta expresión por determinantes:

$$-M_{11}u_{2+} - M_{12}u_{1-}u_{2+} + M_{21} + M_{22}u_{1-} = 0, \quad (3.136)$$

$$M_{11}u_{2+} - M_{22}u_{1-} + M_{12}u_{1-}u_{2+} - M_{21} = 0.$$

De esta expresión podemos llegar a cualquier material bidimensional, si queremos un caso particular, lo único que debemos hacer es adaptar el coeficiente del espinor.

3.6. Probabilidad de transmisión en general

Para la probabilidad de transmisión debemos calcular el cociente:

$$T = \left| \frac{j_x^{out}}{j_x^{in}} \right|, \quad (3.137)$$

donde j_x^{in} y j_x^{out} son las probabilidades de densidades de corriente de las ondas de entrada en la región semi-infinita izquierda y de salida de la región derecha semi-infinita respectivamente. Para la probabilidad de densidad de corriente de entrada:

$$j_x^{in} = v_F A^\dagger \begin{pmatrix} 1 & (u_{1+})^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} A \begin{pmatrix} 1 \\ u_{1+} \end{pmatrix} v_F |A|^2 (u_{1+} + (u_{1+})^\dagger). \quad (3.138)$$

Realizando de manera similar para la probabilidad de densidad de salida:

$$j_x^{out} = v_F |C|^2 (u_{2+} + (u_{2+})^\dagger). \quad (3.139)$$

Por lo que el cociente nos queda como:

$$T = \frac{u_{2+} + (u_{2+})^\dagger}{u_{1+} + (u_{1+})^\dagger} \left| \frac{C}{A} \right|^2. \quad (3.140)$$

Para obtener el cociente $\frac{C}{A}$, debemos evaluar $F(x)$ en las interfaces, es decir en $x = x_1$ y $x = x_2$.

$$M \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ u_{1+} & u_{1-} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} 1 \\ u_{2+} \end{pmatrix}. \quad (3.141)$$

Lo que nos lleva a un sistema de dos ecuaciones.

$$(M_{11} + M_{12}u_{1+})A + (M_{11} + M_{12}u_{1-})B = C, \quad (3.142)$$

$$(M_{21} + M_{22}u_{1+})A + (M_{21} + M_{12}u_{1-})B = u_{2+}C.$$

Resolviendo el sistema y despejando lo que es de nuestro interés, tenemos que:

$$\frac{C}{A} = \frac{u_{1+} - u_{1-}}{M_{11}u_{2+} - M_{22}u_{1-} + M_{12}u_{2+}u_{1-} - M_{21}}. \quad (3.143)$$

Al sustituir en nuestra expresión para la probabilidad de transmisión.

$$T = \frac{u_{2+} + (u_{2+})^\dagger}{u_{1+} + (u_{1+})^\dagger} \cdot \frac{|u_{1+} - u_{1-}|^2}{|M_{11}u_{2+} - M_{22}u_{1-} + M_{12}u_{2+}u_{1-} - M_{21}|^2}. \quad (3.144)$$

Si suponemos que las regiones semi-infinitas izquierda y derecha $u_{2+} = u_{1+} = u_+$ y $u_{2-} = u_{1-} = u_-$ son iguales, esta expresión toma la forma de:

$$T = \frac{u_+ + (u_+)^\dagger}{u_+ + (u_+)^\dagger} \cdot \frac{|u_+ - u_-|^2}{|M_{11}u_+ - M_{22}u_- + M_{12}u_+u_- - M_{21}|^2}, \quad (3.145)$$

$$T = \frac{|u_+ - u_-|^2}{|M_{11}u_+ - M_{22}u_- + M_{12}u_+u_- - M_{21}|^2}. \quad (3.146)$$

De esta expresión podemos llegar a cualquier material bidimensional, si queremos un caso particular, lo único que debemos hacer es adaptar el coeficiente del espinor.

3.7. Estados de transmisión perfecta

En el proceso de transmisión tenemos una parte propagante y una parte discreta, en ambas partes se tienen varios estados de gran interés como los estados de resonancia Fano [39,40], estados cuasi ligados [41], estados de transmisión perfecta [8,42] que son los que a nosotros nos interesan. Estos estados se distinguen porque tienen la particularidad de estar en la parte propagante y tener una probabilidad de transmisión perfecta, además, se ha demostrado que para materiales convencionales al variar uno de sus parámetros como puede ser el ancho o el alto de la barrera, estos estados se vuelven estados acotados dentro de la perturbación [8], en los materiales convencionales que son los tridimensionales los cuales son estudiados con electrones tipo Schrödinger también se ha demostrado su continuidad [42]. Nosotros estamos interesados en el estudio de estos estados para materiales bidimensionales, en los casos de grafeno, siliceno y TMDs. Para el estudio de estos estados de transmisión perfecta, utilizamos uno de los métodos matemáticos por excelencia utilizados para el estudio de excitaciones elementales que es el conocido como método de matriz de transferencia. Existe una gran gama de matrices de transferencia para el estudio de dichas excitaciones en materiales convencionales [9], sin embargo, ninguna de estas matrices es idéntica a la que se utiliza en los materiales bidimensionales porque en los convencionales son electrones masivos y en los bidimensionales son sin masa, la más parecida es la matriz de transferencia de coeficientes, sin embargo en este caso lo que se transfiere son las componentes del bi-espinor. Retomemos la expresión del artículo [8] que es la Ec. (1.8) de dicho trabajo.

$$\frac{4k^2}{k^2[M_{11} + M_{22}]^2 + [k^2M_{12} - M_{21}]^2} = 1. \quad (3.147)$$

Sí se cambia alguno de los parámetros, por ejemplo la profundidad del pozo, la E_r cambiará, decrecerá, por lo que existe un valor para este parámetro de tal manera que $E_r = V_1$ y en este caso $k = 0$ por estar en la interfaz del pozo de potencial. En este caso, el denominador de la expresión anterior debe ser cero; comparando con la expresión para estados acotados del mismo artículo [8], se puede ver que M_{21} debe ser igual a cero, esta condición es consistente con la aparición de un estado acotado. En el caso de los materiales bidimensionales es muy distinto debido a que estos

estados no sólo aparecen en esa región, el vector transversal juega un papel importante en estos materiales, además aparecen estados acotados sin importar si es una barrera o pozo, porque se pueden estar confinando electrones o huecos.

3.7.1. Grafeno

Partiendo de nuestra expresión para estados acotados.

$$M_{11}u_{2+} - M_{22}u_{1-} + M_{12}u_{1-}u_{2+} - M_{21} = 0. \quad (3.148)$$

En el caso del grafeno los coeficientes son:

$$u_{\pm} = \frac{\hbar v_F(\pm k_x + ik_y)}{E}. \quad (3.149)$$

Tomando un sistema en el cual los potenciales de los extremos son iguales, es decir que:

$$u_{\pm 1} = u_{\pm 2} = u_{\pm}. \quad (3.150)$$

$$\frac{\hbar v_F}{E}[(M_{11} + M_{22})k_x + i(M_{11} - M_{22})k_y] - \frac{\hbar^2 v_F^2}{E^2}(k^2)(M_{12} + M_{21}) = 0. \quad (3.151)$$

Utilizando la relación de dispersión para el grafeno.

$$E = \pm \hbar v_F |k|, \quad (3.152)$$

$$\frac{\hbar v_F}{E}[(M_{11} + M_{22})k_x + i(M_{11} - M_{22})k_y] - M_{12} - M_{21} = 0. \quad (3.153)$$

Haciendo uso de los elementos de la matriz de transferencia del grafeno.

$$2k_x \hbar v_F \cos q_x D + 2i \frac{k_y^2}{q_x} \hbar v_F \sin q_x D - 2Ei \frac{E - V_0}{\hbar v_F q_x} \sin q_x D = 0, \quad (3.154)$$

$$k_x \cos q_x D + i \left[\frac{k_y^2}{q_x} \sin q_x D - \frac{(E - V_0)E}{\hbar^2 v_F^2 q_x} \sin q_x D \right] = 0. \quad (3.155)$$

Simplificando con la relación de dispersión del grafeno:

$$k_x q_x \cos q_x D + i [k_y^2 - kq] \sin q_x D = 0. \quad (3.156)$$

Para tener estados acotados, debemos exigir que el vector de onda k_x sea imaginario, por lo que hagamos $k_x \rightarrow i\kappa_x$.

$$\kappa_x q_x \cot q_x D + k_y^2 - kq = 0. \quad (3.157)$$

En el caso del vector de onda q_x , este puede ser o real o imaginario puro, en el caso de que sea imaginario puro, hacemos $q_x \rightarrow i\alpha_x$.

$$\kappa_x \alpha_x \coth \alpha_x D + k_y^2 - kq = 0. \quad (3.158)$$

Por lo que los estados acotados estarán dados por dos regiones.

$$\kappa_x q_x \cot q_x D + k_y^2 - kq = 0 \quad (E - V_0)^2 > (\hbar v_F k_y)^2, \quad (3.159)$$

$$\kappa_x \alpha_x \coth \alpha_x D + k_y^2 - kq = 0 \quad (E - V_0)^2 < (\hbar v_F k_y)^2. \quad (3.160)$$

Para analizar la relación que existe entre los estados acotados y los de transmisión perfecta, realizamos un programa numérico que varía el ancho de la barrera para calcular tanto la transmisión como los estados acotados. En este caso usamos un tamaño de celda de la misma dimensión que la distancia inter atómica en el grafeno $a = 0.142$ nm, un vector transversal de $k_y = 0.05 a^{-1}$ y un potencial de $V_0 = 0.1$ eV. Para ver cuáles de los estados propagantes se han convertido en estos acotados, tomemos nuestra expresión para la probabilidad de transmisión (3.146) y utilicemos los coeficientes del grafeno (3.149), eso nos lleva a la siguiente expresión.

$$T = \frac{4k_x^2}{|(M_{11} + M_{22})k_x + i(M_{11} - M_{22})k_y - \frac{E}{\hbar v_F}(M_{12} + M_{21})|^2}. \quad (3.161)$$

Tomando los elementos de la matriz de transferencia del grafeno y sustituyéndolos:

$$\begin{aligned}
 T &= \frac{4k_x^2}{|2k_x \cos q_x D + 2ik \left[\frac{k_y^2}{q_x} - \frac{E-V_0}{\hbar v_F q_x} \right] \sin q_x D|^2}, \\
 &= \frac{1}{\cos^2 q_x D + \frac{1}{k_x^2 q_x^2} [kk_y^2 - kq] \sin^2 q_x D}, \\
 &= \frac{1}{1 - \sin^2 q_x D + \frac{1}{k_x^2 q_x^2} [kk_y^2 - kq] \sin^2 q_x D}, \\
 T &= \frac{1}{1 + \frac{k_y^2}{k_x^2 q_x^2} (\pm|k| - \pm|q|)^2 \sin^2 q_x D}.
 \end{aligned} \tag{3.162}$$

Si realizamos un programa numérico para graficar nuestra expresión para la probabilidad de transmisión variando el ancho de barrera. En la Figura (3.4) podemos ver la transmisión contra la

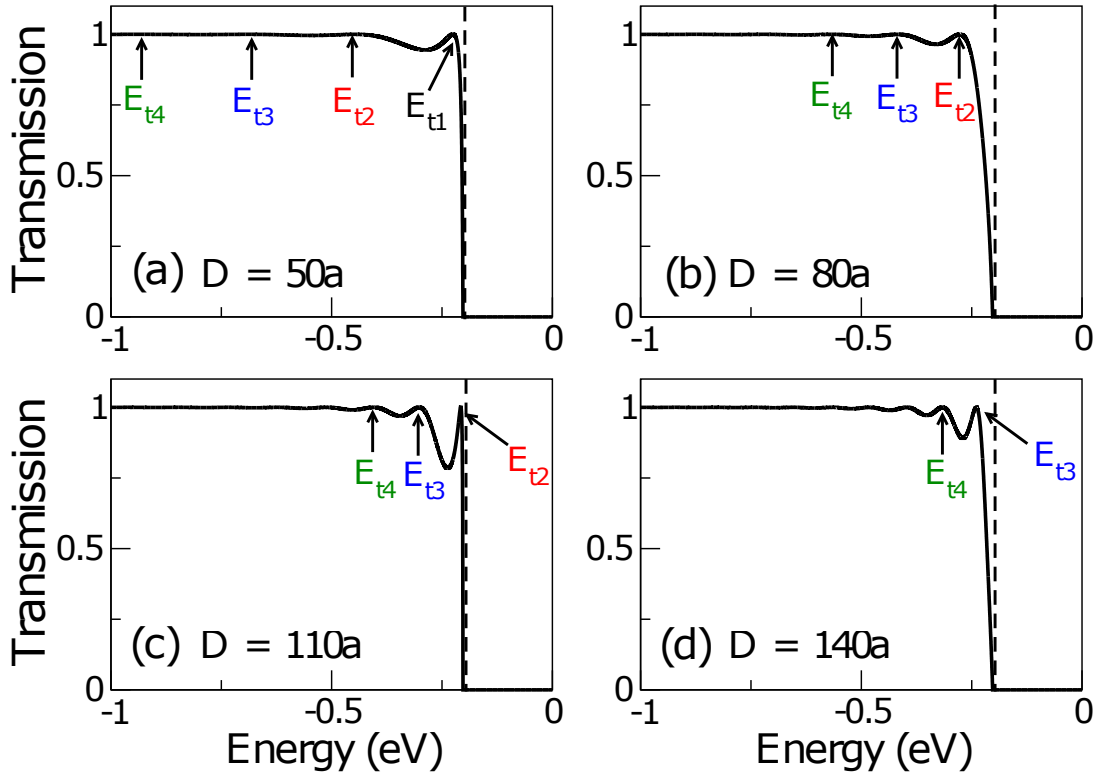


Figura 3.4: Gráficas para la expresión (3.162) con $k_y = 0.05 \text{ a}^{-1}$, $V_0 = 0.1 \text{ eV}$, $a = 0.142 \text{ nm}$; en las gráficas los anchos de la barrera son en a) 50 a, en b) 75 a, en c) 100 a y en d) 140 a. Los estados de transmisión perfecta son los marcados por E_{tn} .

energía, en cada uno de los incisos se varía el ancho de la barrera y se puede observar la evolución de los estados de transmisión perfecta, la expresión que se gráfica es la (3.162), podemos ver que

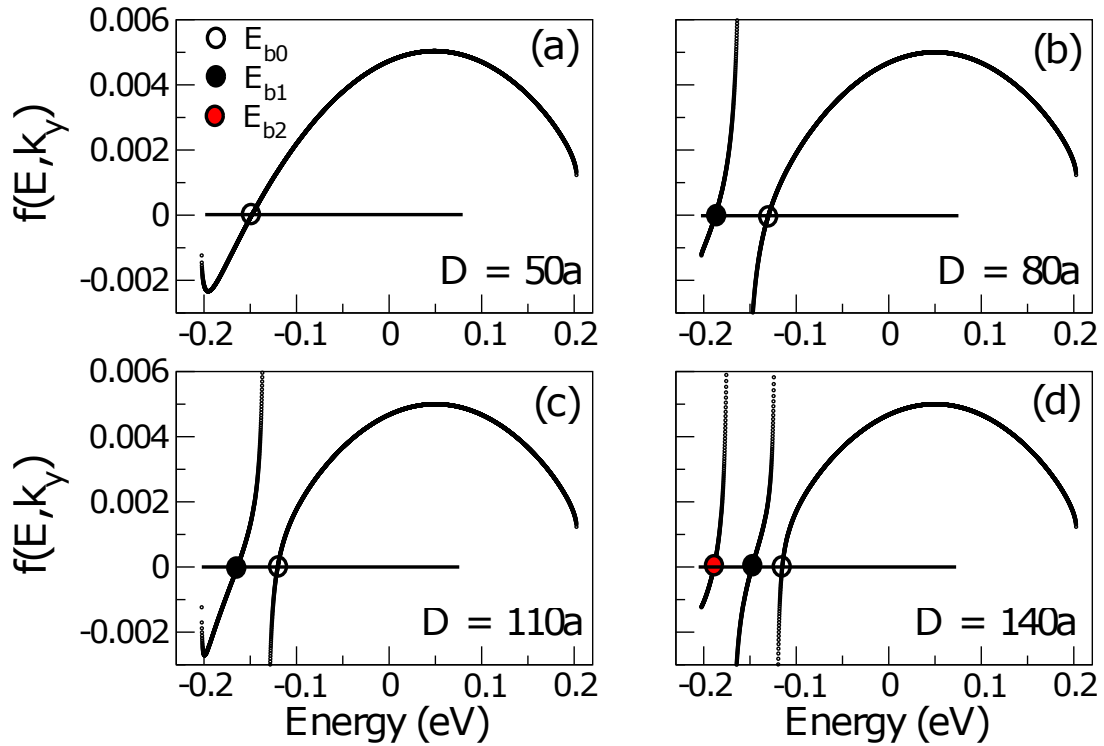


Figura 3.5: Gráficas de las expresiones trascendentes (3.159) y (3.160). Tenemos $k_y = 0.05 a^{-1}$, $V_0 = 0.1$ eV, $a = 0.142$ nm; en a) tenemos un ancho de barrera de $50 a$, en b) un ancho de barrera de $75 a$, en c) un ancho de $100 a$, y en d) un ancho de $140 a$. La intersección con la línea horizontal determina la energía del estado acotado.

entre más ancha es la barrera, se atrapan mas estados, volviendose estados acotados. En la Figura (3.5) podemos ver las dos regiones de la función trascendente contra la energía. Los circulos representan el cruce de la función con el cero. Por nuestro análisis es un estado acotado, estas Figuras son dentro de la barrera de potencial. Se puede observar que entre más grande sea el ancho de la barrera, más estados se confinan. En la Figura (3.6) se puede observar gráficamente la continuidad entre los estados de transmisión perfecta y los acotados. En este caso, además, se varia el vector de onda transversal. Se puede observar que entre mayor es el vector de onda, menor es la energía a la que se confinan los estados de transmisión perfecta. En la Fig. 3.6 podemos ver como los estados de transmisión perfecta se vuelven en los estados acotados, por lo que no cualquier estado en el propagante se vuelve un estado acotado, sólo aquellos que cumplen la condición de ser estados de transmisión perfecta en la parte propagante.

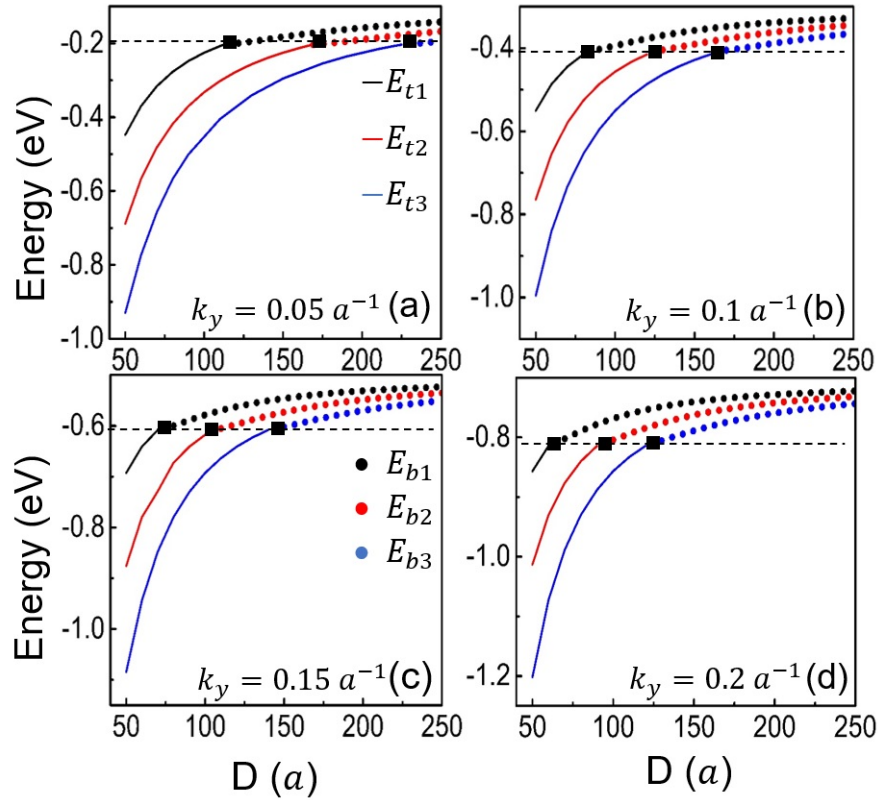


Figura 3.6: Energía contra el ancho de barrera para 3 estados, por debajo de la línea a trazos son estados de transmisión perfecta, por arriba son estados acotados. Los parámetros son los mismos de la Fig. 3.4, en este caso se varía el valor de k_y .

3.7.2. Siliceno

De igual manera como lo hicimos en el grafeno, partiremos de nuestra expresión general para los estados acotados 3.137, utilizaremos los coeficientes como están escritos en la expresión para el siliceno 3.54, de la misma manera como en el caso del grafeno, tomemos el caso particular en el cual los medios semi-infinitos tienen el mismo potencial y dentro de la perturbación $V(x) = V_0$.

$$\begin{aligned}
 &M_{11}\hbar v_F(k_x + \eta i k_y)(E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)) - M_{12}\hbar^2 v_F^2(k_x - \eta i k_y)(k_x + \eta i k_y) \\
 &\quad + M_{22}\hbar v_F(k_x - \eta i k_y)(E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)) \\
 &\quad - M_{21}(E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z))(E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)) = 0.
 \end{aligned} \tag{3.163}$$

Utilizando los elementos de la matriz de transferencia en el siliceno Ec. 3.59.

$$\kappa_x q_x \cot q_x D - i \left[k_y^2 + \frac{E(E - V_0) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2}{\hbar^2 v_F^2} \right] = 0. \quad (3.164)$$

Para ver los estados acotados, tenemos que exigir que el vector de onda k_x sea imaginario puro, así que $k_x \rightarrow i\kappa_x$.

$$\kappa_x q_x \cot q_x D - k_y^2 - \frac{E(E - V_0) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2}{\hbar^2 v_F^2} = 0. \quad (3.165)$$

En el caso del vector de onda q_x tenemos dos posibilidades, que sea real o imaginario puro, en el caso de que sea imaginario $q_x \rightarrow i\alpha_x$.

$$\kappa_x \alpha_x \cot \alpha_x D - k_y^2 - \frac{E(E - V_0) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2}{\hbar^2 v_F^2} = 0. \quad (3.166)$$

En el caso del siliceno las regiones para los estados acotados serían:

$$\kappa_x q_x \cot q_x D - k_y^2 - \frac{E(E - V_0) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2}{\hbar^2 v_F^2} = 0, \quad (E - V_0)^2 > (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2 + (\hbar v_F k_y)^2, \quad (3.167)$$

$$\kappa_x \alpha_x \cot \alpha_x D - k_y^2 - \frac{E(E - V_0) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2}{\hbar^2 v_F^2} = 0, \quad (E - V_0)^2 < (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2 + (\hbar v_F k_y)^2. \quad (3.168)$$

En el caso de la probabilidad de transmisión para el siliceno, retomamos nuestra expresión general (3.99), tomando en cuenta que los coeficientes para el siliceno están dados por la ecuación (3.54).

$$T = \frac{\left| \frac{2\hbar v_F k_x}{E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \right|^2}{\frac{\hbar^2 v_F^2}{[E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)]^2} \left| [M_{11} + M_{22}]k_x + i\eta[M_{11} - M_{22}]k_y - k^2 M_{12} \frac{\hbar v_F}{E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} - \frac{E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)}{\hbar v_F} M_{21} \right|^2}, \quad (3.169)$$

$$T = \frac{4}{\left| [M_{11} + M_{22}] + i\eta [M_{11} - M_{22}] \frac{k_y}{k_x} - \frac{k^2}{k_x} M_{12} \frac{\hbar v_F}{E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} - \frac{1}{k_x} M_{21} \frac{E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)}{\hbar v_F} \right|^2}. \quad (3.170)$$

Utilizando la matriz de transferencia del siliceno 3.59.

$$\begin{aligned} T &= \\ &= \frac{4}{\left| 2 \cos q_x D + i \left[2 \frac{k_y^2}{k_x q_x} - \frac{k^2}{k_x q_x} \frac{\hbar v_F}{E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \frac{E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)}{\hbar v_F} - \frac{[E - V_0 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)][E - V_0 + (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)]}{\hbar^2 v_F^2 q_x k_x} \right] \sin q_x D \right|^2} \\ &= \frac{1}{\left| \cos q_x D + i \left[\frac{k_y^2}{k_x q_x} - \frac{k^2}{2k_x q_x} - \frac{(E - V_0)^2 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2}{2\hbar^2 v_F^2 k_x q_x} \right] \sin q_x D \right|^2}, \\ &= \frac{1}{\cos^2 q_x D + \frac{1}{k_x^2 q_x^2} \left[k_y^2 - \frac{k^2}{2} - \frac{(E - V_0)^2 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2}{2\hbar^2 v_F^2} \right]^2 \sin^2 q_x D}, \\ &= \frac{1}{1 - \sin^2 q_x D + \frac{1}{k_x^2 q_x^2} \left[k_y^2 - \frac{k^2}{2} - \frac{(E - V_0)^2 - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2}{2\hbar^2 v_F^2} \right]^2 \sin^2 q_x D}, \\ T &= \frac{1}{1 + \frac{1}{k_x^2 q_x^2} \left[k_y^2 + \frac{E(E - V_0) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2}{\hbar^2 v_F^2} + k_x q_x \right] \left[k_y^2 + \frac{E(E - V_0) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2}{\hbar^2 v_F^2} - k_x q_x \right] \sin^2 q_x D}. \quad (3.167) \end{aligned}$$

En esta expresión podemos ver que si despreciamos las cantidades que no entran en el grafeno, recuperamos su expresión, por lo que podemos decir que el grafeno es un caso particular del siliceno. Para observar si los estados de transmisión perfecta son los que se vuelven estados acotados como en el caso del grafeno, realizamos un programa numérico para seguir algunos de estos estados en el continuo hasta dentro de la perturbación, en este caso se tomó un $a = 20$ nm como referencia para los anchos. Una energía de referencia $E_0 = 18.1$ meV, un potencial de la misma magnitud

de la energía de referencia (V_0), un vector de onda vertical $k_y = 0.2 a$, el efecto spín órbita de $\Gamma_{SO} = 3.9$ meV, una diferencia de energía entre las sub-redes de $\Delta_z = 1.9$ meV y las componentes tanto del spín como el valle up $\eta = 1, \sigma = 1$, con lo que obtenemos la siguiente gráfica.

En la Fig. 3.7 podemos observar que la tendencia en el siliceno se mantiene como en el grafeno,

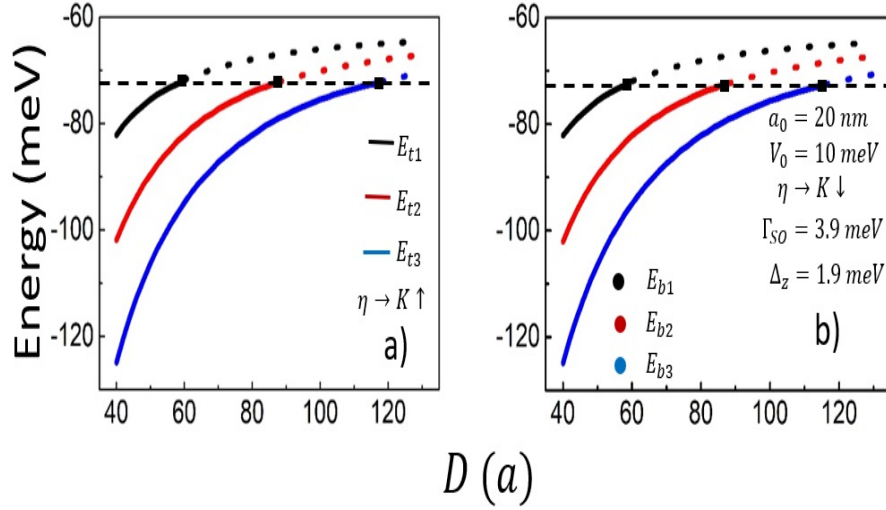


Figura 3.7: Energía contra el ancho de barrera para 3 estados, por debajo de la línea a trazos son estados de transmisión perfecta, por arriba son estados acotados. Los parámetros utilizados son: $a = 20$ nm, $E_0 = 18.1$ meV, $V_0 = 10$ meV, $k_y = 0.2 a$, $\Gamma_{SO} = 3.9$ meV, $\Delta_z = 1.9$ meV. En la Figura tenemos el valle K, en a) tenemos espín up y en b) tenemos espín down.

lo único que cambia son los rangos de energía. En esta figura podemos ver la continuidad entre los estados de transmisión perfecta y los acotados. Se puede observar que con espín down, se confinan primero los estados, no es necesario que el ancho sea tan grande.

3.7.3. TMD's

De la misma manera que en los materiales anteriores, retomemos la ecuación general para los estados acotados (3.137) tomando en cuenta que las soluciones linealmente independientes son

distintas, por lo que los coeficientes están dados por la expresión (3.64).

$$\left[(M_{11} + M_{22})\eta k_x + i(M_{11} - M_{22})k_y - k^2 \frac{\hbar v_F}{(E - \sigma\eta\Gamma_{SO}) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} M_{12} \right] - M_{21} = 0. \quad (3.166)$$

Ahora tomamos la matriz de transferencia para los dicalcogenuros 3.67.

$$\begin{aligned} 2\eta k_x \cos q_x D + i \left[2\eta \frac{k_y^2}{q_x} - \frac{\hbar v_F}{(E - \sigma\eta\Gamma_{SO}) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} \frac{(E - \sigma\eta\Gamma_{SO}) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)}{\eta \hbar v_F q_x} \right] \sin q_x D \\ - i \left[\frac{[(E - \sigma\eta\Gamma_{SO}) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)][(E - V_0 - \sigma\eta\Gamma_{SO}) + (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)]}{\hbar^2 v_F^2 q_x} \right] \sin q_x D = 0, \\ \kappa_x q_x \cot q_x D + i \left[k_y^2 - \frac{(E - \sigma\eta\Gamma_{SO})(E - V_0 - \sigma\eta\Gamma_{SO}) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2}{\hbar^2 v_F^2} \right] = 0. \end{aligned} \quad (3.164)$$

De la misma manera que en los materiales anteriores, para poder tener estados acotados, debemos exigirle al vector de onda k_x que sea imaginario puro, por lo que hacemos un cambio de variable de tal manera que $k_x \rightarrow i\kappa_x$.

$$\kappa_x q_x \cot q_x D + k_y^2 - \frac{(E - \sigma\eta\Gamma_{SO})(E - V_0 - \sigma\eta\Gamma_{SO}) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2}{\hbar^2 v_F^2} = 0. \quad (3.165)$$

Y para encontrar las dos regiones para los estados acotados, el vector q_x puede ser real o imaginario puro $q_x \rightarrow i\alpha_x$.

$$\kappa_x q_x \cot q_x D + k_y^2 - \frac{(E - \sigma\eta\Gamma_{SO})(E - V_0 - \sigma\eta\Gamma_{SO}) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2}{\hbar^2 v_F^2} = 0, \quad (3.166)$$

$$(E - V_0 - \sigma\eta\Gamma_{SO})^2 > (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2 + \hbar^2 v_F^2 k_y^2,$$

$$\kappa_x \alpha_x \coth \alpha_x D + k_y^2 - \frac{(E - \sigma\eta\Gamma_{SO})(E - V_0 - \sigma\eta\Gamma_{SO}) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2}{\hbar^2 v_F^2} = 0, \quad (3.166)$$

$$(E - V_0 - \sigma\eta\Gamma_{SO})^2 < (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)^2 + \hbar^2 v_F^2 k_y^2. \quad (3.167)$$

Para la probabilidad de transmisión recuperamos nuestra expresión general (3.146) con los coeficientes pertinentes para los dicalcogenuros (3.64). Al realizar las operaciones necesarias, podemos

llegar a nuestra expresión para la transmisión.

$$T = \frac{1}{\cos^2 q_x D + \frac{1}{k_x^2 q_x^2} \left[k_y^2 - \frac{k^2}{2} \frac{(E-V_0-\sigma\eta\Gamma_{SO})-(\sigma\eta\Gamma_{SO}-\Delta_z)}{(E-\sigma\eta\Gamma_{SO})-(\sigma\eta\Gamma_{SO}-\Delta_z)} - \frac{[(E-\sigma\eta\Gamma_{SO})-(\sigma\eta\Gamma_{SO}-\Delta_z)][(E-V_0-\sigma\eta\Gamma_{SO})-(\sigma\eta\Gamma_{SO}-\Delta_z)]}{2\hbar^2 v_F^2} \right] \sin^2 q_x D},$$

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{k_x^2 q_x^2} \left[k_y^2 - \frac{(E-\sigma\eta\Gamma_{SO})(E-V_0-\sigma\eta\Gamma_{SO})-(\sigma\eta\Gamma_{SO}-\Delta_z)^2}{\eta\hbar^2 v_F^2} + k_x q_x \right] \left[k_y^2 - \frac{(E-\sigma\eta\Gamma_{SO})(E-V_0-\sigma\eta\Gamma_{SO})-(\sigma\eta\Gamma_{SO}-\Delta_z)^2}{\eta\hbar^2 v_F^2} - k_x q_x \right] \sin^2 q_x D} \quad (3.167)$$

En este caso, podemos definir como $\beta_1 = k_y^2 - \frac{(E-\sigma\eta\Gamma_{SO})(E-V_0-\sigma\eta\Gamma_{SO})-(\sigma\eta\Gamma_{SO}-\Delta_z)^2}{\eta\hbar^2 v_F^2} - k_x q_x$ y $\beta_2 = k_y^2 - \frac{(E-\sigma\eta\Gamma_{SO})(E-V_0-\sigma\eta\Gamma_{SO})-(\sigma\eta\Gamma_{SO}-\Delta_z)^2}{\eta\hbar^2 v_F^2} + k_x q_x$.

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{k_x^2 q_x^2} \beta_1 \beta_2 \sin^2 q_x D} \quad (3.167)$$

Para analizar las expresiones para estados acotados y probabilidad de transmisión, se realizó un programa numérico para ver si sigue la tendencia de que sólo algunos de los estados propagantes se pueden convertir en discretos, que de hecho, son los llamados estados de transmisión perfecta, en este caso se tomaron diferentes parámetros debido al cambio en el rango energético del material, los cuales fueron; $V_0 = 1$ eV, $k_y = 0.2$ a^{-1} , $\Gamma_{SO} = 3.75 \times 10^{-2}$ eV, $\Delta_z = 0.83$ eV. Podemos ver que

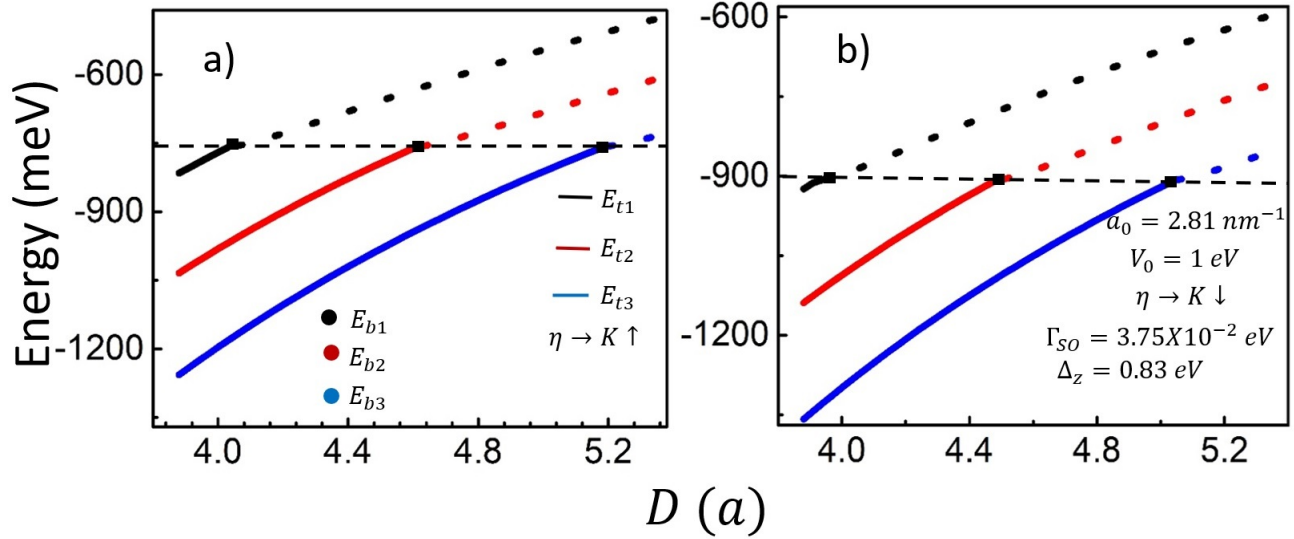


Figura 3.8: Energía contra el ancho de barrera para 3 estados, por debajo de la línea a trazos son estados de transmisión perfecta, por arriba son estados acotados. Los parámetros utilizados son: $a = 2.81 \text{ nm}^{-1}$, $V_0 = 1$ eV, $k_y = 0.2$ a^{-1} , $\Gamma_{SO} = 3.75 \times 10^{-2}$ eV, $\Delta_z = 0.83$ eV.

en la Fig. 3.8, se mantiene lo que habíamos visto en los materiales anteriores. Los estados que se

vuelven estados acotados, son los estados de transmisión perfecta. Podemos observar que como en el caso del siliceno, con el espín down se confinan los estados antes que con el espín up.

3.8. Transmitancia y semitraza de la matriz de transferencia

En el caso de los materiales bidimensionales, también podemos encontrar una relación entre la probabilidad de transmisión y la semitraza de su matriz de transferencia.

3.8.1. Grafeno

La ecuación de Sturm-Liouville para electrones tipo Dirac, se puede escribir como:

$$[\mathbf{P}(\mathbf{x}) + \mathbf{Y}(\mathbf{x})] \frac{dF(x)}{dx} + \mathbf{W}(\mathbf{x})F(x) = 0. \quad (3.168)$$

En el caso del grafeno los coeficientes están dados por:

$$\mathbf{B}(x) = 0. \quad (3.169)$$

$$\mathbf{P}(x) + \mathbf{Y}(x) = i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.170)$$

$$\mathbf{W}(x) = \begin{pmatrix} E - V(x) & i\hbar v_F k_y \\ -i\hbar v_F k_y & E - V(x) \end{pmatrix}. \quad (3.171)$$

Las soluciones de un problema unidimensional de eigenvalores, se transfieren a lo que llamamos la matriz de transferencia, que bajo este contexto, transfiere las componentes F_U y F_D del bi espinor de la función de onda; por lo que las columnas de la matriz de transferencia constituyen las soluciones linealmente independientes de los eigenvalores del problema, a saber:

$$\begin{pmatrix} 0 & i\hbar v_F \\ i\hbar v_F & 0 \end{pmatrix} \frac{d}{dx} \begin{pmatrix} M_{11} \\ M_{21} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} E - V(x) & i\hbar v_F k_y \\ -i\hbar v_F k_y & E - V(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11} \\ M_{21} \end{pmatrix} = 0. \quad (3.172)$$

Lo que nos lleva a 2 ecuaciones por cada columna tomada de la matriz de transferencia, es decir:

$$i\hbar v_F \frac{dM_{21}}{dx} + (E - V(x))M_{11} + i\hbar v_F k_y M_{21} = 0, \quad (3.173)$$

$$i\hbar v_F \frac{dM_{11}}{dx} + (E - V(x))M_{21} + i\hbar v_F k_y M_{11} = 0, \quad (3.174)$$

$$i\hbar v_F \frac{dM_{22}}{dx} + (E - V(x))M_{12} + i\hbar v_F k_y M_{22} = 0, \quad (3.175)$$

$$i\hbar v_F \frac{dM_{12}}{dx} + (E - V(x))M_{22} + i\hbar v_F k_y M_{12} = 0. \quad (3.176)$$

Tomando la segunda y la tercer expresión para armar la traza de la matriz de transferencia:

$$\frac{d}{dx}[M_{11} + M_{22}] = (M_{11} - M_{22})k_y + i \frac{E - V(x)}{\hbar v_F} (M_{12} + M_{21}). \quad (3.177)$$

En el caso del grafeno:

$$s_1 |q| = \frac{E - V(x)}{\hbar v_F}. \quad (3.178)$$

Por lo que nuestra expresión se puede escribir como:

$$\frac{d}{dx}[M_{11} + M_{22}] = (M_{11} - M_{22})k_y + i|q|(M_{12} + M_{21}). \quad (3.179)$$

Ahora dividimos nuestra expresión por $2q_x$ y lo multiplicamos por la unidad imaginaria.

$$\frac{i}{q_x} \frac{d}{dx} \frac{M_{11} + M_{22}}{2} = \frac{1}{2} \left[i \frac{k_y}{q_x} (M_{11} - M_{22}) - s_1 \frac{|q|}{q_x} (M_{12} + M_{21}) \right]. \quad (3.180)$$

Definiendo una función con la semitrazada de la matriz de transferencia.

$$f(x) = \frac{1}{2}(M_{11} + M_{22}). \quad (3.181)$$

Retomando la probabilidad de transmisión en el caso del grafeno

$$T = \frac{4k_x^2}{|(M_{11} + M_{22})k_x + i(M_{11} - M_{22})k_y - \frac{E}{\hbar v_F}(M_{12} + M_{21})|^2}. \quad (3.182)$$

Factorizando el $4k_x^2$ Tenemos:

$$T = \frac{1}{\left| \frac{1}{2}(M_{11} + M_{22}) + \frac{1}{2} \left[i \frac{k_y}{q_x} (M_{11} - M_{22}) - s_2 \frac{|k|}{k_x} (M_{12} + M_{21}) \right] \right|^2}. \quad (3.183)$$

Comparandola con (3.181), podemos escribir la probabilidad de transmisión como:

$$T = \frac{1}{f^2(x) + \frac{1}{q_x^2(x)} \left[\frac{df(x)}{dx} \right]^2}. \quad (3.184)$$

Debemos tener en cuenta, que la ecuación se tiene que evaluar en el extremo derecho de la perturbación, con lo cual:

$$q_x \rightarrow k_x, \quad (3.185)$$

$$s_1 \rightarrow s_2, \quad (3.186)$$

$$|q| \rightarrow |k|. \quad (3.187)$$

3.8.2. Siliceno

En el caso del siliceno los coeficientes están dados por:

$$\mathbf{B}(x) = 0. \quad (3.188)$$

$$\mathbf{Y}(x) + \mathbf{P}(x) = -i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.189)$$

$$\mathbf{W}(x) = \begin{pmatrix} E - V(x) + \sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z & i\hbar v_F \eta k_y \\ -i\hbar v_F \eta k_y & E - V(x) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z) \end{pmatrix}. \quad (3.190)$$

Lo que nos llevará a las siguientes 4 expresiones:

$$-i\hbar v_F \frac{d}{dx} M_{21} + [E - V(x) + (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)]M_{11} + i\hbar v_F \eta k_y M_{21} = 0, \quad (3.191)$$

$$-i\hbar v_F \frac{d}{dx} M_{11} + [E - V(x) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)]M_{21} - i\hbar v_F \eta k_y M_{11} = 0, \quad (3.192)$$

$$-i\hbar v_F \frac{d}{dx} M_{22} + [E - V(x) + (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)]M_{12} + i\hbar v_F \eta k_y M_{22} = 0, \quad (3.193)$$

$$-i\hbar v_F \frac{d}{dx} M_{12} + [E - V(x) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)]M_{22} - i\hbar v_F \eta k_y M_{12} = 0. \quad (3.194)$$

De la misma manera como en el grafeno, tomamos las 2 expresiones que nos forman la traza de la matriz de transferencia.

$$-\frac{d}{dx}[M_{11} + M_{22}] = \eta(M_{11} - M_{22})k_y \quad (3.195)$$

$$-\frac{i}{\hbar v_F} [(E - V(x) + (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z))M_{21} + (E - V(x) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z))M_{21}].$$

Analogamente como en el caso del grafeno, multiplicamos por la unidad imaginaria y dividimos entre $2q_x$.

$$-\frac{i}{q_x} \frac{d}{dx} \left[\frac{M_{11} + M_{22}}{2} \right] = i \frac{\eta}{2} [M_{11} - M_{22}] \frac{k_y}{q_x} \quad (3.195)$$

$$-\frac{1}{2\hbar v_F q_x} [(E - V(x) + (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z))M_{12} + (E - V(x) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z))M_{21}].$$

Multiplicando el segundo término del lado derecho de la igualdad por su conjugado y usando la relación de dispersión del siliceno.

$$-\frac{i}{q_x} \frac{d}{dx} \left[\frac{M_{11} + M_{22}}{2} \right] = i \frac{\eta}{2} [M_{11} - M_{22}] \frac{k_y}{q_x} - \frac{|q|^2}{2q_x} \frac{\hbar v_F}{(E - V(x)) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} M_{12} \quad (3.195)$$

$$-\frac{1}{2q_x} \frac{(E - V(x)) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)}{\hbar v_F} M_{21}.$$

Llevando la expresión de la probabilidad de transmisión a la misma forma como en el grafeno:

$$T = \frac{1}{\left| \frac{1}{2}[M_{11} + M_{22}] + i \frac{\eta}{2}[M_{11} - M_{22}] \frac{k_y}{k_x} - \frac{|k|^2}{2k_x} \frac{\hbar v_F}{E - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} M_{12} - \frac{1}{2k_x} \frac{E - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)}{\hbar v_F} M_{21} \right|^2}. \quad (3.194)$$

En la interfaz entre los medios semi infinitos y la perturbación.

$$k_x \rightarrow q_x, \quad (3.195)$$

$$|k| \rightarrow |q|. \quad (3.196)$$

Retomando la ecuación que propusimos para la semisuma de la traza Ec. (3.181).

$$T = \frac{1}{f^2(x) + \frac{1}{q_x^2(x)} \left[\frac{df(x)}{dx} \right]^2}. \quad (3.197)$$

3.8.3. TMDs

En el caso de los TMDs, tomando los coeficientes de Sturm-Liouville, tenemos las siguientes 4 expresiones.

$$-i\hbar v_F \eta \frac{dM_{21}}{dx} + [(E - V(x)) - \Delta_z] M_{11} + i\hbar v_F k_y M_{21} = 0, \quad (3.198)$$

$$-i\hbar v_F \eta \frac{M_{11}}{dx} + [(E - V(x) - \sigma\eta\Gamma_{SO}) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)] M_{21} - i\hbar v_F k_y M_{11} = 0, \quad (3.199)$$

$$-i\hbar v_F \eta \frac{dM_{22}}{dx} + [(E - V(x)) - \Delta_z] M_{12} + i\hbar v_F k_y M_{22} = 0, \quad (3.200)$$

$$-i\hbar v_F \eta \frac{M_{12}}{dx} + [(E - V(x) - \sigma\eta\Gamma_{SO}) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)] M_{22} - i\hbar v_F k_y M_{12} = 0. \quad (3.201)$$

Realizando transformaciones como en los casos anteriores, podemos escribir las expresiones que forman la traza, de la siguiente manera.

$$\begin{aligned} & -\frac{i}{q_x} \frac{d}{dx} \left[\frac{M_{11} + M_{22}}{2} \right] = i[M_{11} - M_{22}] \frac{\eta k_y}{2q_x} \\ & -\frac{\eta |k|^2}{2q_x} \frac{\hbar v_F}{(E - V(x) - \sigma\eta\Gamma_{SO}) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)} M_{12} + \frac{\eta}{2q_x \hbar v_F} [(E - V(x) - \sigma\eta\Gamma_{SO}) - (\sigma\eta\Gamma_{SO} - \Delta_z)] M_{21}. \end{aligned} \quad (3.200)$$

Llevando la expresión para la transmitancia a la misma forma:

$$T = \frac{1}{\left| \frac{1}{2}[M_{11} + M_{22}] + i[M_{11} - M_{22}] \frac{\eta k_y}{2k_x} - \frac{\hbar v_F}{(E - \sigma \eta \Gamma_{SO}) - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)} \frac{\eta |k|^2}{k_x} M_{12} - \frac{(E - \sigma \eta \Gamma_{SO}) - (\sigma \eta \Gamma_{SO} - \Delta_z)}{2\hbar v_F k_x} \eta M_{21} \right|^2}. \quad (3.200)$$

De la misma manera como en los casos anteriores, en la interfaz:

$$k_x \rightarrow q_x, \quad (3.201)$$

$$|k| \rightarrow |q|. \quad (3.202)$$

Podemos escribir la probabilidad de transmisión de la misma manera que en los casos anteriores:

$$T = \frac{1}{f^2(x) + \frac{1}{q_x^2(x)} \left[\frac{df(x)}{dx} \right]^2}. \quad (3.203)$$

Por lo que podemos ver que las expresiones que se derivan para la traza, son de carácter universal como sucede en el artículo titulado *Transfer matrix in one dimensional problems* reportado por los el Dr. M. E. Mora y R. Pérez en 1985 [43], aún cuando en ese artículo es para sistemas periódicos.

Capítulo 4

Conclusiones

Aplicamos el método de matriz de transferencia en materiales bidimensionales para una barrera de potencial, adaptamos la ecuación de Sturm-Liouville para los hamiltonianos tipo Dirac.

- Encontramos expresiones para una matriz de transferencia del bi espinor para el grafeno, el siliceno y los TMDs. Dichas expresiones matemáticas son únicas ya que no tienen equivalente en el caso de las matrices de transferencia definidas para el caso de problemas de Schrödinger, estas expresiones podrán ser utilizadas para cualquier investigación futura en la cual se puedan aprovechar las características de dichas matrices.
- Utilizamos las matrices de transferencia para encontrar en cada uno de los casos mencionados anteriormente, expresiones para los estados acotados y la probabilidad de transmisión en el caso del grafeno, siliceno y el disulfuro de molibdeno.
- Encontramos expresiones generales para los estados acotados y la probabilidad de transmisión para cualquier material bidimensional que tenga un hamiltoniano matemáticamente similar.
- Utilizamos las expresiones de los estados acotados y la probabilidad de transmisión para definir los estados de transmisión perfecta y demostrar tanto analítica como numéricamente la continuidad entre estos estados y los estados acotados.

Trabajo a futuro

El método como tal desarrollado en la tesis para los hamiltonianos de primer orden, se puede adaptar para el borofeno y los TMDs con estructura de bandas inclinada o 1T'-TMDs. Debido a que tienen hamiltonianos similares a los estudiados en este trabajo. Asimismo, se puede aplicar el formalismo de Sturm-Liouville y la matriz de transferencia a hamiltonianos de segundo orden como el fosforeno y la bicapa de grafeno.

Por ejemplo, el hamiltoniano a bajas energías del borofeno se puede escribir como [44]:

$$H = v_x \tau_x p_x + v_y \tau_y p_y + v_t I p_x, \quad (4.1)$$

donde τ_x y τ_y son las matrices de Pauli, I es la matriz unitaria de 2×2 . El hamiltoniano describe un cono anisotrópico de Dirac en 2D que se describe con 3 constantes v_x , v_y y v_t que son las velocidades en las direcciones x , y y la inclinación en la dirección x respectivamente [44]. En el caso de la bicapa de grafeno, el hamiltoniano a bajas energías está descrito por [45]:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \begin{pmatrix} 1 & (q_x - iq_y)^2 \\ (q_x + iq_y)^2 & 1 \end{pmatrix} + V(x), \quad (4.2)$$

donde q_x y q_y son los vectores de onda en las direcciones x y y respectivamente, m es la masa efectiva y $V(x)$ representa el potencial electrostático. Para este hamiltoniano, en principio se podría aprovechar toda la gama de matrices de transferencia que se definen en sistemas 1D basados a semiconductores.

Productos académicos

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

- M. Ibarra-Reyes, R. Pérez-Álvarez & I. Rodríguez-Vargas, Transfer matrix in 1D Dirac-like problems, *J. Phys: Condens. Matter* **35**, 395301 (2023).
- Presentación de un trabajo titulado Continuidad entre estados de transmisión perfecta y estados acotados en grafeno, presentado en el taller de Física de la Materia Condensada y Molecular en el año 2023.
- Un artículo casi terminado con los resultados del siliceno y los TMD's.

Bibliografía

- [1] A. B. Alexander, G. Suchismita *et al.* Superior thermal conductivity of single- layer graphene, Nano Lett. **8**, 902 (2008).
- [2] R. C. Daniel, D. Benjamin *et al.* Experimental review of graphene, ISRN Condensed Matter Physics, **56**, (2012).
- [3] P.R. Wallace, The band theory of graphite, Phys. Rev. **71**, 622 (1947).
- [4] Y. Junji, L. Guy Le, Beyond silicene: synthesis of germanene, stanene and plumbene, Jpn. J. Appl. Phys, **54**, 1347 (2021).
- [5] Y. Wang, Transfer matrix theory of monolayer graphene/bilayer graphene heterostructure superlattice, J. Appl. Phys. **116**, 164317 (2014).
- [6] E. J. Guzmán, O. Navarro *et al.* Transport properties and thermoelectric effects in gated silicene superlattices, J. Appl. Phys. **124**, 144305 (2018).
- [7] W. Lu, H. Tian *et al.* Spin- and valley- dependent negative magnetoresistance in a ferromagnetic MoS_2 junction with a quantum well, Phys. Rev. B **98**, 075405 (2018).
- [8] R. Pérez- Álvarez y H. Rodríguez- Coppola, Transfer matrix in 1D Schrödinger problems with constant and position- dependent mass, Phys. Status Solidi B **145**, 493 (1988).
- [9] R. Pérez-Álvarez y F. García-Moliner, Transfer Matrix, Green Function and related Techniques, Universitat Jaume (2004).
- [10] M. E. Rose, Relativistic Electron Theory, Wiley, New York (1961).

- [11] E. W. Keith, E. S. Paul, Graphene synthesis. Diamond and related materials, Elsevier **46**, 25 (2014).
- [12] Z. Yuanbo, T. Yan-Wen *et al.* Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene, Nature **438**, 201 (2005).
- [13] A. A. Balandin, Phononics of Graphene and Related Materials, ACS Nano **14**, 5170 (2020).
- [14] K. T. Santosh, S. Sumanta *et al.* Graphene research and their outputs: Status and prospect, J. Adv. Mater. **5**, 10 (2020).
- [15] A. Pablo, N. Kostya S., Recent advances in graphene and other 2D materials, Nano. Mater. Sci. **4**, 3 (2022).
- [16] L. Wang y S. Zhu, Electronic band gaps and transport properties in graphene superlattices with one dimensional periodic potentials of square barriers, Phys. Rev. B **81**, 205444 (2010).
- [17] K. S. Novoselov, A. K. Geims *et al.* Electric field effect in atomically thin carbon films, Science **306**, 666 (2004).
- [18] A. K. Geims y K. S. Novoselov, The rise of graphene, Nat. Mater. **6**, 183 (2007).
- [19] K. S. Novoselov, A. K. Geims *et al.* Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene, Nature **438**, 197 (2005).
- [20] Y. Zhang, Y. W. Tan. *et al.* Experimental observation of the quantum Hall Effect and Berry's phase in graphene, Nature **438**, 201 (2005).
- [21] Tomado de: <https://culturacientifica.com/2015/09/23/buscando-conos-de-dirac-que-no-est-en-el-grafeno/>.
- [22] G. G. Guzmán-Verri, L. C. Lew Yan Voon, Electronic structure of silicon-based nanostructures, Phys. Rev. B **76**, 075131 (2007).
- [23] T. Kyozauro y S. Kenji, Electronic structure of Si-skeleton materials, Phys. Rev. B **39**(15), 11028 (1989).

- [24] T. Kyozauro y S. Kenji, Theoretical possibility of stage corrugation in Si and Ge analogs of graphite, *Phys. Rev. B* **50**, 14916 (1994).
- [25] N. Hideyuki, I. Masahiko *et al.* Preparation and structure of novel siloxene nanosheets, *Chem. Commun.* **23**, 2945 (2005).
- [26] N. Hideyuki, M. Takuya *et al.* Soft synthesis of single-crystal silicon monolayer sheets, *Angew Chem Int Ed Engl.* **118**, 6451 (2006).
- [27] Y. Junji y L. Guy, Beyond silicene: synthesis of germanene, stanene and plumbene, *Jpn. J. Appl. Phys.* **59**, 1347 (2020).
- [28] K. Abdelkader, E. Hanna *et al.* A review on silicene- New candidate for electronics, *Surf. Sci. Rep.* **67**, 1 (2012).
- [29] M. Alessandro, G. Carlo *et al.* Silicene, silicene derivatives, and their device applications, *Chem. Soc. Rev.* **47(16)**, 1 (2018).
- [30] M. Pere, A. Martha *et al.* An atlas of two-dimensional materials *Chem. Soc. Rev.* **43**, 6537 (2014).
- [31] D. Paola, K. Osamu *et al.* Multilayer Silicene Nanoribbons, *Nano. Lett.* **12(11)**, 5500 (2012).
- [32] G. Francisco, Propiedades electrónicas y magnéticas de dicalcogenuros de metales de transición en la nanoescala, universidad de Buenos Aires, (2015).
- [33] M. Sajedeh, O. Dmitry *et al.* 2D transition metal dichalcogenides, *Nat. Rev.* **2**, 17033 (2017).
- [34] M. Ashraf, C. Sudhanshu, Visible region absorption in TMDs/phosphorene heterostructures for use in solar energy conversion applications, *RSC Adv.* **10**, 31730 (2020).
- [35] A. Splendiani, L. Sun *et al.* Emerging Photoluminescence in Monolayer MoS₂, *Nano. Lett.* **10**, 1271 (2010).
- [36] Tomado de: <https://www.udt.cl/la-tabla-periodica-de-los-elementos-cumple-150-anos/>.

- [37] Tomado de: [https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=File:Monolayer TMDC structure.jpg](https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=File:Monolayer_TMDC_structure.jpg).
- [38] R. Oiwa, H. Kusunose *et al.* Theory of superconductivity in hole-doped monolayer MoS₂, Phys. Rev. B **98**, 064509 (2018).
- [39] A. Johnson, C. Marcus *et al.* Coulomb-modified Fano resonance in a one-lead quantum dot, Phys. Rev. Lett. **93**, 106803 (2004).
- [40] K. Kobayashi, H. Aikawa *et al.* Fano resonance in a quantum wire with a side-coupled quantum dot, Phys. Rev. B **70**, 035319 (2004).
- [41] E. A. Carrillo- Delgado, I. Rodríguez- Vargas *et al.* Continuum electronic bound states in rectangular quantum wells and barriers, PIRS Online. **5**, 137 (2009).
- [42] G. Bastard, U. O. Ziemelis *et al.* Bound and virtual bound states in semiconductor quantum wells, Solid State Commun. **49**, 671 (1984).
- [43] M. E. Mora, R. Pérez *et al.* Transfer matrix in one dimensional problems, J. Physique **46**, 1021 (1985).
- [44] M. Nakhaee, S. A. Ketabi *et al.* Tight-binding model for borophene and borophane, Phys. Rev. B **97**, 125424 (2018).
- [45] J. A. Briones-Torres y I. Rodríguez-Vargas, fano resonances in bilayer graphene superlattices, Sci. Rep. **7**, 16708 (2017).

Transfer matrix in 1D Dirac-like problems

M Ibarra-Reyes¹ , R Pérez-Álvarez^{2,*}  and I Rodríguez-Vargas^{1,*} 

¹ Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, Circuito Marie Curie S/N, Parque de Ciencia y Tecnología QUANTUM Ciudad del Conocimiento, 98160 Zacatecas, Zacatecas, Mexico

² Centro de Investigación en Ciencias, Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, 62209 Cuernavaca, Morelos, Mexico

E-mail: rpa@uaem.mx and isaac@uaz.edu.mx

Received 22 May 2023, revised 14 June 2023

Accepted for publication 19 June 2023

Published 28 June 2023



Abstract

The transfer matrix method is considered to obtain the fundamental properties of 1D Dirac-like problems. The case of 1D problems in monolayer graphene is addressed. The main characteristics of the transfer matrix are analyzed, contrasting them with the ones corresponding to 1D Schrödinger-like problems. Analytic expressions for the transmission coefficient and bound states are obtained. The continuity between bound states and states of perfect transmission is demonstrated in general, and in particular showed for the case of single electrostatic barriers. These findings in principle can be extended to 2D materials with Hamiltonian similar to monolayer graphene such as silicene and transition metal dichalcogenides.

Keywords: transfer matrix, 1D Dirac-like problems, bound states, states of perfect transmission

(Some figures may appear in colour only in the online journal)

1. Introduction

One dimensional systems are quite relevant from both the fundamental and technological standpoint. The properties of these systems for different elemental excitations can be obtained through the so-called transfer matrix method. There are several treatises documenting the transfer matrix method for different elemental excitations [1–7]. For instance, Griffiths and Steinke [1] used the transfer matrix to study matter, mechanical and electromagnetic waves in locally periodic media. The transfer matrix used in this treatise was the so-called transfer matrix of coefficients, which relates the coefficients of the waves in a region of the periodic media with the coefficients of the waves in other region of the periodic media. This matrix in conjunction with the Bloch's theorem allows to obtain important physical quantities such as the transmission coefficient and

bound states. In the same fashion Yeh [2] used the transfer matrix of coefficients to study the propagation of optical waves in layered media. Pereyra *et al* [3, 4] also used the transfer matrix to develop a theory for finite periodic systems obtaining important physical properties. In this treatise the authors deal with matter waves, specifically Schrödinger electrons, and a transfer matrix that transfers the wave function from one point of the system to another. In addition, the finiteness and periodicity are fully incorporated in the theory without any need for Bloch functions and reciprocal space. Markos and Soukoulis [5] also implemented the transfer matrix to study Schrödinger electrons in ordered and disordered systems, and the propagation of electromagnetic waves in photonic crystals and left-handed materials. In recent times, the transfer matrix has been used to analyze bound states for Schrödinger electrons in squeezing potentials [6]. In particular, it was found non-trivial bound states for derivative Dirac's delta function potentials. A more robust treatise of the transfer matrix method was developed by Pérez-Álvarez and García-Moliner [7]. With

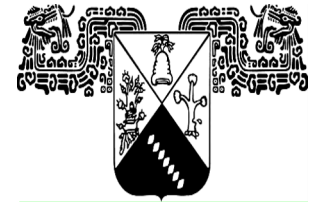
* Authors to whom any correspondence should be addressed.

XVI Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular

20-22 de junio de 2022

Centro de Investigación en Ciencias

Universidad Autónoma del Estado de Morelos



UAEM

Cuerpo Académico de
Física del Estado Sólido

El Comité Organizador agradece a

Manuel Ibarra Reyes, Isaac Rodríguez Vargas y

Rolando Pérez-Álvarez

Por la presentación de la Conferencia

**“Continuidad entre estados de transmisión perfecta
y estados acotados en grafeno”**

En el Décimo Sexto Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular,
llevado a cabo en el Centro de Investigación en Ciencias, Universidad
Autónoma del Estado de Morelos.

Dra. Gabriela Hinojosa Palafox

Directora del Centro de Investigación en Ciencias



Cuernavaca Morelos C.P. 62209, México.

“Ciudad de la eterna primavera”

