

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA
FACULTAD DE CIENCIAS**



**MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS E INGENIERÍA
ÁREA DE FÍSICA**

**Mecanismos de Confinamiento Lateral en Nanocintas de
Grafeno**

TESIS

que para cubrir los requisitos necesarios para obtener el grado de

DOCTOR EN CIENCIAS

Presenta:

EDGAR JOVANNI ROBLES RAYGOZA

Ensenada, Baja California, México, 31 de Mayo de 2024.

Mecanismos de Confinamiento Lateral en Nanocintas de Grafeno

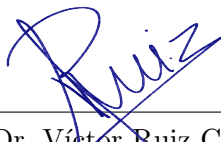
Tesis que para obtener el grado de Doctor en Ciencias presenta

Edgar Giovanni Robles Raygoza

APROBADA POR EL SIGUIENTE COMITÉ:



Dr. Ramón Carrillo Bastos
Director del Comité



Dr. Víctor Ruiz Cortés
Codirector del Comité



Dr. Jorge Alberto Villavicencio Aguilar
Miembro del Comité



Dr. Francisco Mireles Higuera
Miembro del Comité



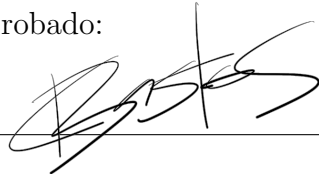
Dra. Priscilla Elizabeth Iglesias Vázquez
Miembro del Comité

Ensenada, Baja California, 31 de Mayo de 2024.

RESUMEN de la tesis de **EDGAR JOVANNI ROBLES RAYGOZA** presentada como requisito parcial para la obtención del grado en **DOCTOR EN CIENCIAS**. Ensenada, Baja California, México, _ del 2024.

Mecanismos de Confinamiento Lateral en Nanocintas de Grafeno

Resumen aprobado:



Dr. Ramón Carrillo Bastos

El grafeno es un material que ha despertado el interés de la comunidad científica debido a sus diversas propiedades físicas exóticas, entre las que destacan sus propiedades mecánicas y electrónicas. El grafeno es un material constituido por carbono puro, con átomos dispuestos en un patrón hexagonal regular, similar al grafito. Es un sustancia casi transparente. Este material se clasifica como un semimetal extremadamente flexible y promete encontrar aplicaciones en campos como la ciencia y la ingeniería, incluyendo el diseño de dispositivos de control y sensores. Sin embargo, una limitación en la construcción de dispositivos electrónicos basados en grafeno radica en la supresión de la conductancia debido a imperfecciones en las fronteras y en la estructura del material, como las vacancias o impurezas. En este trabajo, proponemos el uso de guías de onda como un mecanismo para abordar la supresión de la conductancia causada por la dispersión debida a defectos. En este sentido, investigamos el transporte electrónico en nanocintas de grafeno con bordes zigzag en presencia de varios mecanismos de confinamiento que generan guías de onda. Realizamos un estudio numérico de la conductancia y la densidad de estados, utilizando el formalismo de Landauer y su relación con las funciones de Green a través de la relación de Fisher-Lee. Nuestro enfoque se centra en los efectos de diferentes mecanismos de confinamiento, como deformaciones y campos escalares, que dan lugar a guías de onda y su capacidad para competir con la dispersión generada por vacancias e impurezas en la nanocinta. Nuestros hallazgos indican que las guías de onda generadas por campos escalares bipolares (compuestos por la superposición de un potencial repulsivo y otro atractivo) son las más eficaces en presencia de defectos en los bordes y en la estructura del material. Consideramos que estos resultados podrían ser útiles para una eventual implementación en sistemas experimentales, ya que los sistemas considerados pueden fabricarse utilizando tecnologías disponibles en la actualidad.

Palabras claves: **Grafeno, Nanocintas, Transporte Electrónico, Desorden Lateral**

ABSTRACT of the thesis presented by **EDGAR JOVANNI ROBLES RAYGOZA** as a partial requirement to obtain the degree in **DOCTORATE IN SCIENCE**. Ensenada, Baja California, México, _ del 2024.

Ballistic guided electrons against disorder in graphene nanoribbons

Abstract approved by:

Dr. Ramón Carrillo Bastos

Graphene is a material that has sparked the scientific community's interest due to its various exotic physical properties, including its mechanical and electronic properties. This material is classified as a highly flexible semimetal and holds high expectations for applications in fields such as science and engineering, including the design of control devices and sensors. However, the principal restriction in constructing graphene-based devices lies in suppressing conductivity due to boundary imperfections and the material's structure, such as vacancies or impurities. In this work, we propose using waveguides to address the suppression of conductivity caused by defect-induced scattering. In this regard, we investigate electronic transport in graphene nanoribbons with zigzag edges in the presence of various confinement mechanisms that give rise to waveguides. We conduct a numerical study of the conductivity and density of states, using the Landauer formalism and its connection with Green's functions through the Fisher-Lee relation. Our focus is on the effects of different confinement mechanisms, such as deformations and scalar fields, which lead to the formation of waveguides and their ability to compete with scattering caused by vacancies and impurities in the nanoribbon. Our findings indicate that waveguides generated by bipolar scalar fields (comprising the superposition of a repulsive potential and an attractive one) are the most effective in the presence of edge and structural defects. These results could be valuable for potential implementation in experimental systems, as the considered systems can be manufactured using currently available technologies.

Keywords: Nanoribbons, Graphene, Electronic transport, Edge Disorder

Índice

| | |
|---|-----------|
| 1. Introducción | 13 |
| 2. Fundamentos teóricos del grafeno | 19 |
| 2.1. Estructura de la red cristalina. | 19 |
| 2.2. El espectro de energías en nanocintas de grafeno | 25 |
| 2.3. Nanocintas zigzag | 27 |
| 2.4. Nanocintas armchair | 28 |
| 3. Transporte electrónico en nanocintas de grafeno | 30 |
| 4. Formalismo de las funciones de Green | 38 |
| 4.1. Función de Green de una partícula | 38 |
| 4.2. La función de Green y la relación con los estados transmitidos | 40 |
| 4.3. Función de Green de la red | 43 |
| 4.4. Autoenergías de los contactos semi infinitos | 45 |
| 4.5. Función de Green recursiva | 48 |
| 5. Efectos de guías de onda en nanocintas de grafeno | 51 |
| 5.1. Deformación gaussiana | 52 |
| 5.2. Pozo de potencial cuadrado | 55 |
| 5.3. Potencial secante hiperbólico | 58 |
| 5.4. Potencial bipolar | 60 |
| 6. Defectos de borde en nanocintas de grafeno | 63 |
| 6.1. Impacto del desorden de borde en la conductancia | 64 |
| 6.2. Guías de onda en nanocintas de grafeno con desorden de borde | 68 |
| 6.3. Deformación gaussiana y el efecto del desorden de borde | 69 |
| 6.4. Potencial pozo cuadrado y el efecto del desorden de borde | 70 |

| | |
|---|------------|
| 6.5. Potencial secante hiperbólico y el efecto del desorden de borde | 71 |
| 6.6. Potencial bipolar y el efecto del desorden de borde | 74 |
| 7. Desorden de bulto en nanocintas de grafeno | 76 |
| 7.1. Modelo de impurezas de Anderson | 77 |
| 7.2. Transporte electrónico en guías de onda con desorden de bulto | 81 |
| 8. Guías de onda en sistemas de Dirac bidimensionales | 88 |
| 8.1. Modelos de grafeno con gap bajo un potencial de pozo secante hiperbólico | 92 |
| 8.1.1. Hamiltoniano para el grafeno con gap | 92 |
| 8.1.2. Hamiltoniano para el grafeno con distorsión Kekulé-O | 95 |
| 8.2. Soluciones exactas | 98 |
| 8.3. Espectro de energía y funciones de onda | 104 |
| 9. Conclusiones | 110 |
| Appendices | 112 |
| A. Cálculo de los valores discretos de Γ | 112 |
| 10.Publicaciones | 114 |

Índice de figuras

| | | |
|----|--|----|
| 1. | Esquema de la configuración del grafeno y los vectores de la red primitiva en el espacio real. | 20 |
| 2. | Estructura electrónica de bandas para el grafeno calculada con la aproximación de amarre fuerte ($E_c(7)$). | 24 |
| 3. | (a) Esquema de un fragmento de la red de grafeno hexagonal mostrando los bordes zigzag y <i>armchair</i> . (b) Celda unitaria de la nanocinta zigzag (rojo) y sus celdas adyacentes (azul y verde) muestran la simetría de traslación de la celda. | 26 |
| 4. | Estructura de bandas para una nanocinta zigzag con 40 sitios de ancho. | 27 |
| 5. | Celda unitaria de la nanocinta <i>armchair</i> (rojo) y sus celdas adyacentes (azul y verde) muestran la simetría de traslación de la celda. | 29 |
| 6. | Propiedades electrónicas de una nanocinta <i>armchair</i> . a) nanocinta con 40 sitios y b) nanocinta con 41 sitios. | 29 |
| 7. | Comparación directa de las propiedades de transporte a baja temperatura de una cinta de nanografeno fabricada sobre (a) dióxido de silicio y (b) sobre hBN. Aparte de las diferencias microscópicas, las propiedades de transporte generales permanecen inalteradas. Figura extraída de Bischoff <i>et al.</i> (2015). | 31 |
| 8. | (a) y (b): Conductancia promedio para nanocintas de grafeno con variación en la rugosidad de los bordes (promedio sobre 10 realizaciones en línea roja, azul, verde y amarillo). Todas las nanocintas tienen la misma longitud ($L = 45$ nm) y anchos similares ($W = 4.4$ nm para la disposición <i>armchair</i> y $W = 4.7$ nm para la disposición en zigzag). (c) Perfiles de la rugosidad utilizados para calcular la conductancia en (a) y (b). (solo se muestran segmentos de la estructura atómica de la nanocinta). Izquierda: disposición <i>armchair</i> ; derecha: disposición en zigzag. Figura extraída de Mucciolo <i>et al.</i> (2009). | 32 |
| 9. | Simulación de una guía de onda p-n en grafeno con compuertas (explicación en texto). Figura extraída de Williams <i>et al.</i> (2011). | 34 |

| | | |
|-----|--|----|
| 10. | (a) Conductancia para una cinta ($L = 27.4 \text{ nm}$ y $W = 25.8 \text{ nm}$) con diferentes parámetros de pliegues tensionados. Las curvas están desplazadas para mayor claridad. Líneas horizontales discontinuas marcan el valor cero para una comparación adecuada. (b) Perfil de LDOS a lo largo de la cinta con paneles superiores/inferiores mostrando resultados para: $\epsilon_m = 0\% - 9.2\%$ (curvas negras a verdes en (a)), (c) LDOS total mejorado producido por el pliegue tensionado, (d) mapa de color de la polarización de subredes. Paneles (b)-(d) obtenidos en $E = 0.05 \text{ eV}$. Parámetros: $W = 27.4 \text{ nm}$, amplitud $A = 0.7 \text{ nm}$ y ancho $b = 1.4 \text{ nm}$. Figura extraída de Carrillo-Bastos <i>et al.</i> (2016). | 35 |
| 11. | (a) Conductancia con dos terminales en función del nivel de Fermi para diferentes guías de onda curvadas, es decir, $D_C = 0, 10.2, 20.4,$ y 30.6 nm . Los parámetros del sistema se eligen como $L = 80 \text{ nm}$, $W = 50 \text{ nm}$ $W_G = 10 \text{ nm}$ y $\delta V = -0.25 \text{ eV}$. (b) Distribución espacial de la densidad de estados de la guía de onda del monomodo único. (c) Coincidencia de las bandas de energía entre los contactos (líneas sólidas) para los sistemas mostrados en el panel (a). Potenciales adicionales en el sitio de -0.22 eV se agregaron a los contactos para alinear las subbandas de conducción similares. Figura extraída de Mosallanejad <i>et al.</i> (2018a). | 37 |
| 12. | Conductor balístico conectado a dos grandes contactos. | 41 |
| 13. | Los contactos también pueden ser considerados en cuenta por su autoenergía. | 46 |
| 14. | Esquema de dos secciones aisladas que se conectan con la ayuda de la ecuación de Dyson para obtener la función de Green del sistema conectado. | 49 |
| 15. | La red hexagonal (o red honeycomb) se puede obtener al establecer ciertos elementos de tuneo a cero. | 51 |
| 16. | Diagrama esquemático de una nanocinta zigzag con deformación gaussiana de longitud L y ancho W conectada a dos contactos. Figura reproducida con permiso Carrillo-Bastos <i>et al.</i> (2016) 2016, Physical Review B. | 52 |
| 17. | a) Conductancia contra energía para una guía de onda con una deformación gaussiana (color naranja) y para una nanocinta prístina (línea negra punteada), b) estructura de bandas, c) densidad local de estados (LDOS) Parámetros: $W = 54.8 \text{ nm}$, amplitud $A = 0.7 \text{ nm}$, y ancho $\alpha = 1.4 \text{ nm}$. | 54 |
| 18. | Conductancia (G) para diferentes valores de amplitud, $A(1, 3, 5, 7 \text{ nm})$, correspondientes a los valores de estiramiento de 0.45% , 4.08% , 11.35% , y 22.25% y ancho fijo $\alpha = 9 \text{ nm}$. La línea punteada representa al sistema en ausencia de deformación. | 55 |

| | | |
|-----|--|----|
| 19. | Imagen representativa de la forma del potencial tipo pozo cuadrado. | 56 |
| 20. | (a) Conductancia contra energía para una guía de onda con un potencial cuadrado atractivo (color naranja) y para una nanocinta prístina (línea negra punteada). (b) Estructura de bandas para una nanocinta zigzag en presencia de un potencial cuadrado atractivo (color naranja) y una nanocinta prístina (color negro punteado). (c) Distribución espacial de la densidad de estados total en presencia del potencial cuadrado atractivo a una energía $E = 0.084 \text{ eV}$. Los parámetros se muestran en el texto. | 57 |
| 21. | Imagen representativa de la forma del potencial tipo secante hiperbólico. | 58 |
| 22. | Conductancia en una guía de onda con un potencial $sech(y)$ (color naranja) y para una nanocinta prístina (línea negra punteada). (b) Estructura de bandas para una nanocinta zigzag en presencia de un potencial $sech(y)$ atractivo (color naranja) y una nanocinta prístina (color negro punteado). (c) Distribución espacial de la densidad de estados total en presencia del potencial $sech(y)$ atractivo a una energía $E = 0.084 \text{ eV}$. Los parámetros se describen en el texto. | 59 |
| 23. | Imagen representativa de la forma del potencial bipolar. | 60 |
| 24. | Conductancia contra energía para una guía de onda con un potencial bipolar (compuesto por un pozo y una barrera) (color naranja) y para una nanocinta prístina (línea negra punteada). (b) Estructura de bandas para una nanocinta zigzag en presencia de un potencial bipolar (color naranja) y una nanocinta prístina (color negro punteado). (c) Distribución espacial de la densidad de estados total en presencia del potencial bipolar a una energía $E = 0.07 \text{ eV}$ | 62 |
| 25. | Diagrama esquemático de una nanocinta zigzag de longitud L y ancho W conectado a los reservorios (naranja). La región central (azul) representa la zona donde se aplica el desorden de borde. | 63 |
| 26. | Conductancia de una nanocinta zigzag (línea continua negra) de ancho $W = 25.8 \text{ nm}$ y largo $L = 54.8 \text{ nm}$, y con 30 % de desorden removiendo un solo átomo de los bordes (línea azul). | 65 |
| 27. | Promedio y desviación estandar de la conductancia para una nanocinta zigzag en presencia de un potencial bipolar en función del número de realizaciones. | 66 |
| 28. | Conductancia promedio para diferentes probabilidades de remover un átomo aleatorio de los bordes, $P_1 = 1\%$ en color verde, $P_1 = 5\%$ en color naranja, $P_1 = 30\%$ en color rojo y el caso prístino en línea negra punteada. | 67 |

| | | |
|-----|--|----|
| 29. | Promedio de la conductancia en escala logarítmica para diferentes tipos de rugosidad. Removiendo un átomo $d = 1 : P_1 = 30\%$, removiendo dos átomos $d = 2 : P_1 = 30\%, P_1 = 20\%$ y tres átomos $d = 3 : P_1 = 30\%, P_1 = 20\%, P_3 = 10\%$ | 68 |
| 30. | Conductancia $G(E)$ para una nanocinta con deformación gaussiana (línea continua naranja), con desorden de borde (línea verde), en ausencia de deformación (línea negra punteada) y sin deformación con desorden de borde (línea gris). Las curvas con desorden de borde se realizaron sobre 100 realizaciones para obtener el promedio de la conductancia. Los parámetros de los defectos de borde son: $P_1 = 30\%, P_2 = 20\%, P_3 = 10\%$ | 70 |
| 31. | Conductancia para una guía de onda con un confinamiento de pozo cuadrado (línea naranja), con desorden de borde (línea verde), en ausencia de guía de onda (línea negra punteada) y en ausencia de potencial con desorden de borde (línea gris). Las curvas con desorden de borde se realizaron con 100 realizaciones para obtener el promedio. Los parámetros de los defectos de borde son: $P_1 = 30\%, P_2 = 20\%, P_3 = 10\%$ | 72 |
| 32. | Conductancia para una guía de onda con un confinamiento $sech(y)$ (línea naranja), con desorden de borde (línea verde) y en ausencia de potencial con desorden (línea gris). La línea negra punteada corresponde al caso libre (sin potencial) y se incluye para indicar las energías a las cuales se modifican los canales. Los parámetros de los defectos de borde son: $P_1 = 30\%, P_2 = 20\%, P_3 = 10\%$ | 73 |
| 33. | Conductancia en una guía de onda con un potencial bipolar (línea naranja) y con desorden de borde (línea verde). La conductancia para el caso prístino se refiere a la línea negra punteada y este caso con desorden de borde en línea gris. Los parámetros de los defectos de borde son: $P_1 = 30\%, P_2 = 20\%, P_3 = 10\%$ | 75 |
| 34. | Diagrama esquemático de una nanocinta zigzag bajo el potencial de bulto aleatorio $U_{imp}(\mathbf{r}_i)$ | 78 |
| 35. | Conductancia promedio como función de la energía para diferentes amplitudes de desorden U para una nanocinta zigzag de ancho $W = 25.8\text{ nm}$ y largo $L = 54.8\text{ nm}$, con una cantidad de impurezas fija de $n_{imp} = 4\%$. Línea punteada es el caso prístino, línea naranja es el potencial de desorden de bulto de $0.25t$, línea verde es el potencial de desorden de bulto de $0.5t$ y línea gris es el potencial de desorden de bulto de $0.75t$ | 79 |
| 36. | Conductancia promedio en función de la longitud L para una nanocinta zigzag de ancho $W = 25.8\text{ nm}$. La energía corresponde a $E = 0.14\text{ eV}$ y se varió la amplitud del desorden de bulto. | 80 |

| | | |
|-----|---|-----|
| 37. | Conductancia promedio como función de la energía para una nanocinta zigzag de ancho $W = 25.8\text{ nm}$ y largo $L = 54.8\text{ nm}$. La línea verde representa el sistema con desorden de borde, mientras que la curva negra presenta desorden de borde más desorden de bulto con una cantidad de impurezas fija de $n_{imp} = 4\%$ | 83 |
| 38. | Conductancia promedio en función de la longitud L para una nanocinta zigzag de ancho $W = 25.8\text{ nm}$. La energía corresponde a $E = 0.14\text{ eV}$ y se vario la amplitud del desorden. | 85 |
| 39. | Conductancia promedio como función de la energía para una nanocinta zigzag de ancho $W = 25.8\text{ nm}$ y largo $L = 54.8\text{ nm}$. La línea verde representa el sistema con desorden de borde, mientras que la curva negra presenta desorden de borde más desorden de bulto con una cantidad de impurezas fija de $n_{imp} = 4\%$ | 87 |
| 40. | (a) Diagrama esquemático de una red hexagonal (tipo panal de abeja) distorsionada con Kekulé en forma de "O". (b) Monocapa de grafeno bajo un pozo de potencial hiperbólico secante definido por la Ecuación (47). | 90 |
| 41. | Espectro de energía de Dirac $\varepsilon_{n,m}$ y valores discretos $\Gamma_{n,m}$. En los paneles (a), (b) y (c), mostramos el espectro de energía de Dirac (82) (puntos cuadrados azules) en función de los valores discretos $\Gamma_{n,m}$ para $n, m = 0, 1, 2, 3, 4, 5$, $\omega = 3.2$ y usando los valores adimensionales de la brecha: $\Gamma_g = 0$, $\Gamma_g = 0.5$, $\Gamma_g = 1$, respectivamente. En el panel (a), los triángulos negros corresponden a los valores de $\varepsilon_{n,m}$ calculados en Hartmann & Portnoi (2014). En el panel (d), mostramos el comportamiento de los valores discretos $\Gamma_{n,m} > 0$ en función de la brecha adimensional Γ_g | 104 |
| 42. | Parte real de las funciones de onda $\text{Re}[\psi_{i,n,m}(x)]$ con $i = I$ (rojo) e $i = II$ (azul) utilizando $\omega = 3.2$, $\Gamma_{n,m} > 0$, y para los valores adimensionales de la brecha $\Gamma_g = 0$, $\Gamma_g = 0.5$ y $\Gamma_g = 1$. En los paneles (a), (b) y (c), mostramos $\text{Re}[\psi_{i,n,m}(x)]$ para $\Gamma_{1,0}$ y $\varepsilon_{1,0}$. Los paneles (d), (e) y (f) son $\text{Re}[\psi_{i,n,m}(x)]$ para $\Gamma_{1,1}$ y $\varepsilon_{1,1}$. En todos estos paneles, las líneas sólidas claras corresponden a $\text{Re}[\psi_{i,n,m}(x)]$ dadas por (88), y las líneas discontinuas indican la solución numérica de las ecuaciones (90) y (91). | 105 |
| 43. | Parte imaginaria de las funciones de onda $\text{Im}[\psi_{i,n,m}(x)]$ con $i = I$ (rojo) e $i = II$ (azul) utilizando $\omega = 3.2$, $\Gamma_{n,m} > 0$, y para los valores adimensionales de la brecha $\Gamma_g = 0$, $\Gamma_g = 0.5$ y $\Gamma_g = 1$. En los paneles (a), (b) y (c), mostramos $\text{Im}[\psi_{i,n,m}(x)]$ para $\Gamma_{1,0}$ y $\varepsilon_{1,0}$. Los paneles (d), (e) y (f) corresponden a $\text{Im}[\psi_{i,n,m}(x)]$ para $\Gamma_{1,1}$ y $\varepsilon_{1,1}$. En todos estos paneles, las líneas sólidas claras corresponden a $\text{Im}[\psi_{i,n,m}(x)]$ dadas por (88), y las líneas discontinuas representan la solución numérica de las Ecs. (90) y (91). | 106 |

44. Densidad de probabilidad $|\psi_{I,n,m}(x)|^2 + |\psi_{II,n,m}(x)|^2$ para $\omega = 3.2$, $\Gamma_{n,m} > 0$, y utilizando los valores adimensionales de la brecha: $\Gamma_g = 0$, $\Gamma_g = 0.5$ y $\Gamma_g = 1.0$. En (a), (b) y (c), mostramos la densidad de probabilidad para $\Gamma_{1,0}$ y $\varepsilon_{1,0}$. Las figuras (d), (e) y (f) corresponden a la densidad de probabilidad para $\Gamma_{1,1}$ y $\varepsilon_{1,1}$. En todos estos paneles, las líneas sólidas claras corresponden a la densidad de probabilidad obtenida a partir de las funciones de onda (88). Las líneas discontinuas representan la solución numérica utilizando las ecuaciones (90) y (91). A partir de estos resultados, es claro que la densidad de probabilidad es invariante respecto al valor de Γ_g 108

Agradecimientos

Agradezco con mucho cariño al Dr. Ramón Carrillo por su tiempo, paciencia y dedicación. Sin su apoyo, no hubiera sido posible llevar a cabo este trabajo de investigación y completar mi formación como doctor en ciencias.

A mi comité de tesis: Dr. Víctor Ruiz Cortés, Dr. Jorge Alberto Villavicencio Aguilar, Dr. Francisco Mireles Higuera y Dra. Priscilla Elizabeth Iglesias Vázquez, les agradezco profundamente por su dedicación, tiempo, sugerencias y valiosas aportaciones para mejorar este trabajo.

Al Dr. Víctor Ibarra Sierra, Dr. Juan Carlos Sandoval Santana y Dr. Pierre Anthony Pantaleón Peralta, les agradezco sus contribuciones y experiencias, que hicieron mi trabajo de tesis más ameno y fructífero.

A mi familia por todo el amor y apoyo que me han brindado a lo largo de este camino. Gracias por siempre estar a mi lado.

Agradezco también al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencia y Tecnología (CONAHCYT) por el apoyo económico otorgado durante mis estudios de doctorado. Asimismo, agradezco a la Universidad Autónoma de Baja California por el apoyo incondicional brindado durante mi estadía en la institución.

1. Introducción

Desde los años 80 años existe un gran interés en la síntesis y caracterización de nuevos materiales para su implementación en dispositivos micrométricos y nanométricos. Este interés, particularmente destacado en el campo de la electrónica, se centra en el comportamiento de la conductividad de estos materiales. La conductividad eléctrica a escala nanométrica da lugar al fenómeno del transporte cuántico de electrones. En estas dimensiones, se manifiestan fenómenos como la cuantización de los estados transmitidos; como son los sistemas electrónicos, los sistemas fotónicos, sistemas nucleares ó sistemas de espín, que están directamente relacionada con la constante de Planck (Planck, 1900; Schubert, 2018). Los primeros experimentos en semiconductores fueron reportados en 1988 por dos grupos diferentes de investigadores, entre los que destaca el trabajo de Wees (Van Wees *et al.*, 1988), quienes divulgaron el hallazgo de una secuencia de mesetas en la gráfica de conductancia. Específicamente, los estados cuantizados se expresan en múltiplos enteros de e^2/h , donde e es la carga del electrón y h es la constante de Planck.

Se han realizado investigaciones, tanto teóricas como experimentales, en las nanocintas de grafeno (GNR's, por sus siglas en inglés) mostrando propiedades electrónicas de interés tecnológico por su vasto potencial en el diseño de dispositivos electrónicos (Mucciolo *et al.*, 2009; Dutta & Pati, 2010; Wakabayashi *et al.*, 2010; Torres *et al.*, 2014; Bischoff *et al.*, 2015; Carrillo-Bastos *et al.*, 2016; Celis *et al.*, 2016; Yagmurcukardes *et al.*, 2016; Marmolejo-Tejada & Velasco-Medina, 2016; Kim *et al.*, 2016; Fujita *et al.*, 1996)

Diversos estudios han revelado que el transporte cuántico balístico a bajas tem-

peraturas está intrínsecamente ligado a la topología de los bordes o condiciones de frontera de las nanocintas de grafeno (GNR's) (Lewenkopf *et al.* , 2008). El término "transporte balístico" se utiliza para describir este movimiento de electrones sin dispersión significativa, similar al movimiento de una bala en un cañón, que viaja a través de un espacio sin ser afectada por fuerzas externas importantes. En particular, los bordes tipo zigzag adquieren una importancia significativa en este fenómeno (Lewenkopf & Mucciolo, 2013). La configuración específica de los bordes, ya sea zigzag o armchair desempeña un papel crucial en las propiedades electrónicas de las GNR's.

Los bordes zigzag presentan propiedades magnéticas y conducen a estados de borde localizados. Esta geometría tiene una estructura atómica única que conduce a la presencia de estados electrónicos localizados en los átomos de carbono de los bordes. Estos estados electrónicos locales pueden estar desapareados, lo que significa que quedan electrones sin aparear en estos átomos de carbono del borde. Esta configuración de electrones desapareados en los bordes zigzag del grafeno puede dar lugar a una fuerte interacción magnética entre ellos, lo que lleva a la formación de momentos magnéticos locales. Estos momentos magnéticos pueden alinearse espontáneamente, generando regiones magnéticas en la nanocinta de grafeno. Este fenómeno es conocido como magnetismo de borde y es responsable de las propiedades magnéticas observadas en las nanocintas de grafeno con bordes zigzag, mientras que los bordes armchair ofrecen mayor estabilidad y exhiben un comportamiento metálico. Esta diversidad en las estructuras de los bordes genera una variabilidad notable en las propiedades de transporte cuántico de las GNRs. Además, la comprensión y manipulación de estas características son esenciales para aprovechar plenamente el potencial de las GNRs en aplicaciones de dispositivos cuánticos a baja temperatura (Wakabayashi *et al.* ,

2010).

La investigación continua en este campo, se enfoca en profundizar la comprensión de los mecanismos subyacentes del transporte cuántico en las GNRs, así como en desarrollar estrategias para controlar y ajustar las propiedades de los bordes. Estos avances son cruciales para la optimización de las GNRs en dispositivos electrónicos cuánticos, abriendo nuevas posibilidades para la nanotecnología y la ingeniería de materiales a escala nanométrica (Torres *et al.* , 2014; Fujita *et al.* , 1996; Nakada *et al.* , 1996).

Comúnmente, las imperfecciones en los bordes y en la estructura volumétrica, surgidas durante la síntesis experimental de las nanocintas de grafeno (GNRs), ejercen un impacto considerable en la conductancia electrónica y el transporte balístico. Estas imperfecciones, que abarcan desde defectos estructurales hasta irregularidades en la disposición atómica, pueden comprometer la integridad de las GNRs y limitar sus propiedades conductivas (Bischoff *et al.* , 2015).

La síntesis de GNRs a menudo da lugar a la presencia de defectos en los bordes, como terminaciones desiguales o la formación de grupos funcionales, que introducen barreras adicionales para el movimiento electrónico. A nivel del bulto, la formación de vacantes, dopaje no deseado y defectos cristalinos contribuyen a la dispersión de los portadores de carga, obstaculizando el transporte balístico (Bischoff *et al.* , 2015). Entender y controlar estas imperfecciones se ha convertido en un desafío crucial para maximizar la eficiencia de las GNRs en aplicaciones electrónicas. Investigaciones actuales se centran en estrategias para minimizar estas imperfecciones durante la síntesis, así como en técnicas de post-procesamiento para reparar y mejorar la calidad estructural de las GNRs. Superar estos desafíos permitirá desbloquear todo el

potencial de las GNRs en dispositivos electrónicos avanzados y abrirá nuevas perspectivas en el diseño de materiales a escala nanométrica (Mucciolo *et al.* , 2009; Bischoff *et al.* , 2015; Munoz-Rojas *et al.* , 2006; Areshkin *et al.* , 2007; Gunlycke *et al.* , 2007; Lherbier *et al.* , 2008; Evaldsson *et al.* , 2008; Li *et al.* , 2008; Basu *et al.* , 2008; Martin & Blanter, 2009; Mucciolo & Lewenkopf, 2010). Para modelar teóricamente las imperfecciones o defectos, se usan potenciales escalares aleatorios puntuales o extendidos, remoción de los términos de tunelaje entre sitios en los Hamiltonianos de los sistemas cuánticos (Valagiannopoulos, 2021). Por ejemplo, en el caso de del desorden de borde, el criterio habitual está basado en remover aleatoriamente sitios atómicos de los bordes de la GNRs (Mucciolo *et al.* , 2009; Li *et al.* , 2008; Basu *et al.* , 2008; Cresti & Roche, 2009). Para al desorden de bulto, tradicionalmente se incluyen potenciales gaussianos con amplitudes aleatorias y distribuciones uniformes (Mucciolo *et al.* , 2009; Lewenkopf *et al.* , 2008; Wurm *et al.* , 2012). Algunos estudios experimentales certifican que con este modelo se puede obtener resultados congruentes con las mediciones de transporte electrónico en GNRs depositando átomos de Cesio en la parte superior de la muestra (Lherbier *et al.* , 2008; Giambastiani *et al.* , 2022).

Los potenciales escalares y las deformaciones de la membrana de grafeno son formas posibles de controlar el transporte electrónico (Querlioz *et al.* , 2008; Ribeiro *et al.* , 2009; Lu & Guo, 2010; Naumis *et al.* , 2017); en particular, estos mecanismos permiten generar una guía de onda dentro de las nanocintas de grafeno para evitar el esparcimiento por los defectos de borde (Cheng *et al.* , 2019). Por ejemplo, las deformaciones uniaxiales gaussianas generan nuevos canales de transporte donde los electrones viajan a través de la región deformada mostrando robustés contra los defectos de borde (Carrillo-Bastos *et al.* , 2016, 2014). Investigaciones recientes abren

la posibilidad de ajustar las propiedades electrónicas del grafeno sobre sustratos de nitruro de Boro hexagonal (hBN, por su abreviación en inglés) a través de deformaciones de hojuelas de grafeno (*flakes*, por su nombre en inglés) o surcos en grafeno (*wrinkles*, por su nombre en inglés) (Giambastiani *et al.* , 2022).

Otras alternativas para implementar guías de onda en GNR son los potenciales locales de compuerta *Local Gate Voltages* (Hartmann *et al.* , 2010; Cao *et al.* , 2017; Mosallanejad *et al.* , 2018b), estos se pueden generar utilizando nanotubos de carbono cargados positiva y/o negativamente situados a cierta distancia de la muestra de grafeno (Hartmann & Portnoi, 2020); en cualquier caso, el número de canales de transporte accesibles depende de la intensidad del potencial y la forma de éste (Rickhaus *et al.* , 2015; Zubair *et al.* , 2019; Shah *et al.* , 2019). El principio básico de las guías de onda es el de crear estados ligados (*bound states*) en la dirección transversal (modos localizados) mientras se mantienen estados propagantes en el otro, de manera similar como se propagan los fotones en una fibra óptica (Friebele & Griscom, 1985; Addanki *et al.* , 2018; Dragic *et al.* , 2018).

Este trabajo consiste en el estudio del comportamiento de la conductancia en GNR's en presencia de guías de onda generadas por deformaciones gaussianas y potenciales escalares, además de considerar defectos de borde y de bulto (Mucciolo *et al.* , 2009; Mucciolo & Lewenkopf, 2010). Utilizando el formalismo de la función de Green recursiva y la aproximación de amarre fuerte aplicada a las nanocintas de grafeno, obtuvimos la conductancia de un sistema de dos terminales y la densidad de estados local (LDOS, por sus siglas en inglés). Además, se estudió el transporte electrónico en nanocintas de grafeno con el efecto de guías de onda y la presencia de desorden en los bordes y en el bulto. Examinamos los casos de tensiones gaussia-

nos, los potenciales tipo pozo cuadrado, el pozo hiperbólico-secante y los potenciales bipolares (compuestos por dos potenciales hiperbólico-secante positivo y otro negativo). Notamos que para $E > 0$, el número de canales balísticos aumenta debido a los modos de propagación en estas guías de onda. Estos canales adicionales son estados de borde modificados por la guía de onda. En presencia de desorden en los bordes y en el volumen, la conductancia disminuye; sin embargo, existen modos de propagación asociados con la guía de onda, que muestran un transporte cuasi balístico. En particular, los pozos cuadrados, los pozos hiperbólicos-secantes y los potenciales bipolares tienen modos protegidos más robustos, incluso al aumentar la longitud de la nanocinta. Esperamos que nuestro trabajo pueda contribuir a mejorar los dispositivos electrónicos basados en grafeno.

2. Fundamentos teóricos del grafeno

El grafeno, una forma bidimensional del carbono, es un material fascinante con propiedades electrónicas únicas derivadas de su estructura cristalina hexagonal y su red de enlaces de sp^2 . En términos fundamentales, su comportamiento electrónico se rige por la teoría de bandas, donde la estructura electrónica del grafeno exhibe una banda de conducción y una banda de valencia que se encuentran en los puntos de alta simetría K y K' conocidos como puntos de Dirac. Esta singularidad da lugar a portadores de carga altamente móviles con una masa efectiva nula, lo que conduce a fenómenos como la conducción balística y a una alta movilidad de electrones (alrededor del orden de 10^6 m/s, 300 veces menor que la velocidad de la luz). Además, la ausencia de banda prohibida en el grafeno lo hace excepcionalmente semi-metálico, con una alta densidad de estados electrónicos en la vecindad de su punto de Fermi. Estas propiedades físicas inherentes al grafeno subyacentes proporcionan una base sólida para comprender y aprovechar las extraordinarias propiedades electrónicas del grafeno en una amplia gama de aplicaciones, desde dispositivos electrónicos ultra rápidos hasta sensores altamente sensibles.

2.1. Estructura de la red cristalina.

El grafeno es un material bidimensional compuesto por átomos de carbono dispuestos en una estructura hexagonal plana, como se muestra en la Fig. 1. Cada átomo en el grafeno está unido a otros tres átomos mediante enlaces covalentes, formando una red tipo panal de abeja (“*honeycomb*” por su nombre en inglés). Esta estructura cristalina puede describirse en términos matemáticos mediante los siguientes

conceptos físicos:

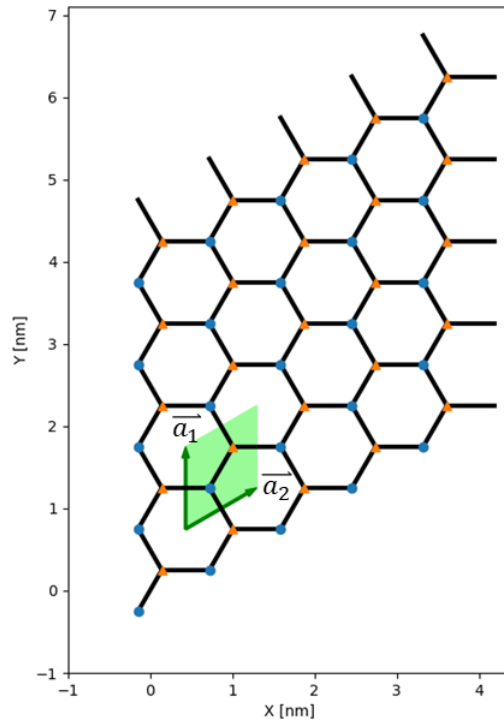


Figura 1: Esquema de la configuración del grafeno y los vectores de la red primitiva en el espacio real.

Red de Bravais

En el grafeno, la red de Bravais se define por dos vectores de traslación linealmente independientes. Los vectores de la red primitiva del grafeno se expresan comúnmente en términos de los vectores de enlace unitarios del carbono, que son \vec{a}_1 y \vec{a}_2 . Estos vectores se pueden definir como:

$$\vec{a}_1 = a \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{a}_2 = a \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{3}{2} \end{pmatrix}$$

donde a es la longitud de los enlaces de carbono en el grafeno. En el caso del grafeno, \vec{a}_1 y \vec{a}_2 tienen la misma magnitud, y forman un ángulo de 60° entre sí, como se muestra en la Figura 1. Para el grafeno, los vectores de la red en el espacio real son:

$$\vec{a}_1 = a\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{x} + \frac{3}{2}\hat{y}\right) \quad (1a)$$

$$\vec{a}_2 = a\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{x} + \frac{3}{2}\hat{y}\right). \quad (1b)$$

Vectores de Base

Dado que el grafeno tiene una estructura hexagonal, un enfoque común es utilizar dos vectores de base para describir la posición de los átomos. Estos vectores, denotados como \vec{b}_1 y \vec{b}_2 se pueden calcular utilizando la siguiente relación:

$$\vec{b}_i = \frac{2\pi}{\text{Área de la celda unitaria}} \times \frac{\vec{a}_j \times \vec{a}_k}{|\vec{a}_j \times \vec{a}_k|} \quad (2)$$

donde j, k son permutaciones circulares de 1, 2, y \times denota el producto cruz. En el caso del grafeno, debido a la simetría hexagonal, \vec{b}_1 y \vec{b}_2 tienen la misma magnitud, donde a través de ellos podemos definir la red recíproca que es todos los puntos que cumple

$$\vec{b}_1 = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}\left(\frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y}\right)} \quad (3a)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}\left(-\frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y}\right)} \quad (3b)$$

donde el parámetro a es la distancia carbón-carbón a primeros vecinos, para el grafeno es de $a = 1.42\text{\AA}$.

Función de onda de los electrones

En la aproximación de amarre fuerte, la función de onda de los electrones en el grafeno se describe mediante la ecuación de Bloch, que tiene la forma:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (4)$$

donde \mathbf{k} es el vector de onda en el plano (x, y) , \mathbf{r} es el vector de posición, y $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ es la parte periódica de la función de onda.

Estructura electrónica de bandas

La estructura electrónica de bandas del grafeno se obtiene resolviendo la ecuación de Schrödinger para los electrones en la red de grafeno, teniendo en cuenta la periodicidad de la red. En el grafeno hay dos puntos no equivalentes en la estructura de bandas, denominadas puntos de Dirac y se encuentran en los vértices de la zona de Brillouin, específicamente en los puntos K y K'. En la vecindad de estos puntos, los electrones se comportan como fermiones de Dirac, lo que significa que exhiben un comportamiento similar al de partículas relativistas sin masa. La banda de valencia está completamente llena, mientras que la banda de conducción está vacía en el grafeno puro a temperatura ambiente.

La relación de dispersión de energía alrededor de los puntos de Dirac es lineal en el grafeno, lo que significa que la energía de los electrones varía linealmente con el momento cerca de estos puntos. Esta relación lineal es responsable de las propiedades únicas de transporte de carga del grafeno, como la alta movilidad de los portadores de carga.

Para obtener la estructura de bandas de grafeno infinito empleamos la aproximación de amarre fuerte a primeros vecinos, en donde solo se considera la probabilidad de que un electrón de la banda π sea transferido de un sitio a uno de sus tres vecinos más cercanos. El hamiltoniano en términos de operadores de aniquilación y creación es

$$H = - \sum_r \sum_i t_0 a_r^\dagger b_{r+\delta_i} + \text{H.c.}, \quad (5)$$

siendo t_0 la amplitud de transferencia de electrones entre sitios con valor de 2.8 eV, a_r^\dagger ($b_{r+\delta_i}$) el operador de creación (aniquilación) en un sitio de la subred A (B) y H.c. el hermitiano conjugado.

Realizando una transformada de Fourier sobre los operadores de aniquilación y creación para pasar al espacio recíproco

$$H(k) = -(k) a_k^\dagger b_k + \text{H.c.}, \quad (k) = t_0 \sum_i e^{ik \cdot \delta_i}. \quad (6)$$

Se puede demostrar que la ecuación que representa la relación de dispersión está dada de la siguiente forma (ver Figura 2), (Castro Neto *et al.* , 2009):

$$E(\mathbf{k}) = \pm t_0 \sqrt{3 + 2\cos(\sqrt{3}k_x a) + 4\cos(\sqrt{3}k_x a/2)\cos(3k_y a/2)}, \quad (7)$$

siendo t_0 la amplitud de tuneleo de los electrones con valor de 2.8 eV, k_x y k_y son los momentos en el espacio recíproco en las direcciones x y y , respectivamente. El valor del tuneleo en el grafeno proviene de su estructura cristalina especial, que le confiere propiedades electrónicas únicas. En ausencia de factores externos como esfuerzos, o campos escalares, donde estos últimos están definidos en cada punto de un espacio y que solo tienen un valor numérico asociado a cada punto, los electrones se pueden

describir haciendo la analogía con partículas libres cuasi-relativistas sin masa. Por esta razón, en los puntos de Dirac (K y K') la relación de dispersión en torno a ellos, a bajas energías se representa mediante la siguiente ecuación

$$E(\vec{k}) = \pm \hbar v_F |\vec{k}|, \quad (8)$$

donde \hbar es la constante de plank reducida, $v_F = 3ta/(2\hbar) \approx 10^6 m/s$ la velocidad de Fermi y a_{cc} es la distancia entre átomos de carbono.

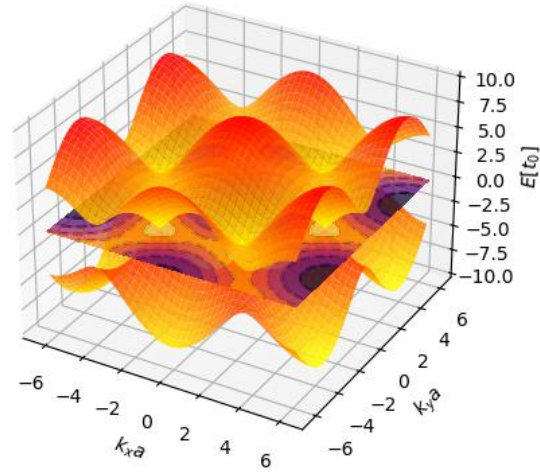


Figura 2: Estructura electrónica de bandas para el grafeno calculada con la aproximación de amarre fuerte (Ec:(7)).

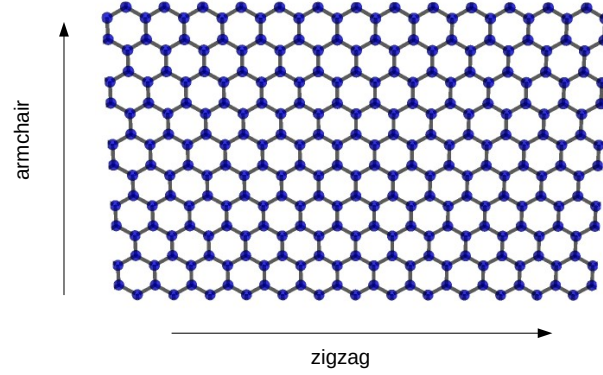
2.2. El espectro de energías en nanocintas de grafeno

En la sección anterior examinamos una hoja infinita de grafeno y realizamos un análisis breve de sus bandas de energía. En esta sección, nos centraremos en la discusión de las propiedades electrónicas de las nanocintas de grafeno. Para estas nanocintas, las propiedades electrónicas exhiben una fuerte dependencia de la orientación de los bordes (Wakabayashi *et al.* , 2010; Castro Neto *et al.* , 2009). Debido a la simetría hexagonal de los átomos de carbono en el grafeno, las nanocintas de grafeno más estudiadas son aquellas que presentan bordes *zigzag* (ZGNRs) y “*arm-chair*” (AGNRs) (Figura 3-a)).

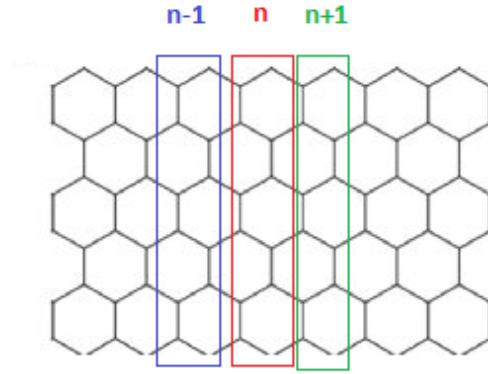
A continuación describiremos la metodología para obtener la estructura de bandas de las nanocintas de grafeno. Considere una nanocinta como se muestra en la Figura 3. Dividimos el sistema en celdas unitarias, es decir en la estructura mínima de repetición para generar el sistema cuasiunidimensional. Sea H_0 el Hamiltoniano de la n -ésima celda unitaria, y H_{10} y H_{01} los Hamiltonianos de las celdas unitarias vecinas a la izquierda y a la derecha respectivamente. Aprovechando la periodicidad de esta manera, podemos reducir el hamiltoniano de la n -ésima celda a solo tres componentes,

$$H\Phi_n = H_{10}\Phi_{n-1} + H_0\Phi_n + H_{01}\Phi_{n+1}, \quad (9)$$

donde H_0 , H_{10} y H_{01} son matrices cuadradas y tienen el rango igual al número de sitios en la celda, es decir tienen dimensión $(N \times N)$. Φ es una función de onda de la forma $\Phi = \phi e^{ikna}$, donde k es el número de onda, n el índice de celda y ϕ un vector columna de $1 \times N$. H_{10} y H_{01} son los Hamiltonianos que conectan la celda unitaria con su vecino inmediato. Para resolver esta ecuación podemos utilizar la expresión



(a)



(b)

Figura 3: (a) Esquema de un fragmento de la red de grafeno hexagonal mostrando los bordes zigzag y *armchair*. (b) Celda unitaria de la nanocinta zigzag (rojo) y sus celdas adyacentes (azul y verde) muestran la simetría de traslación de la celda.

para Φ en la ecuación (9). Cancelando los términos comunes e^{ikna} se puede obtener

$$H_0\phi = (H_0 + H_{01}e^{ika} + H_{10}e^{-ika})\phi, \quad (10)$$

esto es

$$E\phi = (H_{10}e^{-ika} + H_0 + H_{01}e^{ika})\phi, \quad (11)$$

esta última ecuación (11), es un problema de eigenvalor para una matriz compleja, misma que resolviendo numéricamente nos permite encontrar la estructura de bandas para la nanocinta.

2.3. Nanocintas zigzag

Una nanocinta zigzag es aquella que exhibe una estructura de repetición zigzag en los bordes, como se muestra en la Figura 3-(a). En esta configuración, cada borde termina con átomos de la misma subred; por ejemplo, átomos A en el borde superior y átomos B del borde inferior. El ancho de una nanocinta zigzag ahora depende del número de átomos en la celda unitaria determinada por

$$W_{zz} = (N - 1) \frac{3}{2} a, \quad (12)$$

donde N es el número de átomos en la celda unitaria y $a = 1.42\text{\AA}$ representa la distancia atómica entre carbono-carbono para primeros vecinos. Para obtener la re-

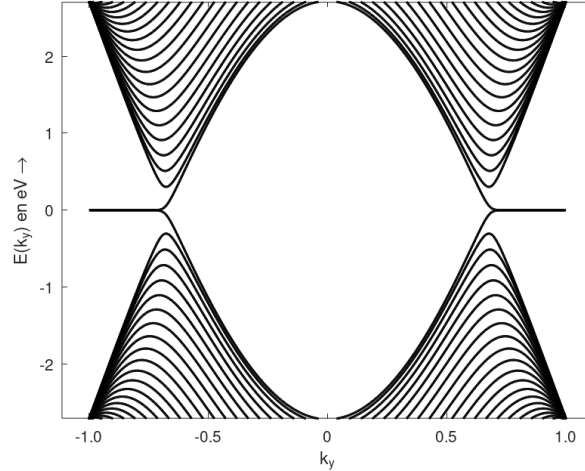


Figura 4: Estructura de bandas para una nanocinta zigzag con 40 sitios de ancho.

lación de dispersión, consideramos que la periodicidad de la nanocinta se encuentra en la dirección x por lo que la función de onda está restringida en la dirección y . Este tipo de nanocintas presenta un comportamiento semi-metálico como se puede observar en la Figura 4. Además de mostrar bandas planas que son un reflejo de la localización de estados de borde, también se puede apreciar una degeneración de estados en la banda de valencia y la banda de conducción alrededor de $k = \pm \frac{2\pi}{3a}$. Los estados disponibles son una consecuencia directa del tipo de corte de la hoja de grafeno y la característica más importante es que los estados de borde no son dispersivos (Castro Neto *et al.* , 2009).

2.4. Nanocintas armchair

La otra geometría de borde se conoce como *armchair*, tal como se muestra en la Figura 5. Cada borde exhibe una terminación que es una combinación de átomos de las subredes A y B. El ancho de una nanocinta *armchair* se determina por el número de átomos en la celda unitaria, similar al caso de la nanocinta zigzag, como se muestra a continuación:

$$W_{ac} = (N - 1) \frac{\sqrt{3}}{2} a, \quad (13)$$

donde N es el número de átomos que contiene la celda unitaria y a es la distancia carbón-carbón a primeros vecinos. Este tipo de nanocintas presenta un comportamiento diferente a las nanocintas armchair. En la Figura 5 se muestra la celda primitiva para el corte zigzag utilizado para calcular la estructura de bandas. El modelo hace referencia a calcular la matriz asociada al Hamiltoniano de la celda de repetición y de las celdas vecinas ($n+1$ y $n-1$). En la Figura 6 se muestra la estructura de bandas $E(k)$ para dos nanocintas *armchair* con anchos de $N_{ac} = 40$ y $N_{ac} = 41$

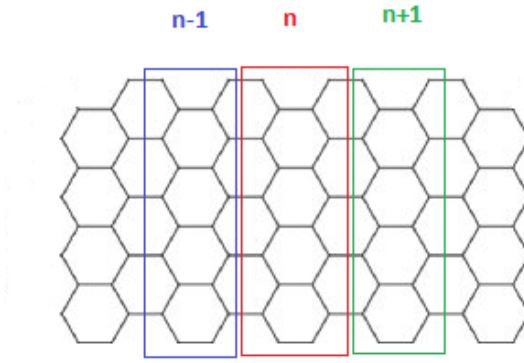


Figura 5: Celda unitaria de la nanocinta *armchair* (rojo) y sus celdas adyacentes (azul y verde) muestran la simetría de traslación de la celda.

respectivamente. Este tipo de nanocintas con $N_{ac} + 1$ que sea divisible entre tres tiene comportamiento metálico, de lo contrario presenta un gap que es inversamente proporcional al ancho (Wakabayashi *et al.* , 2010).

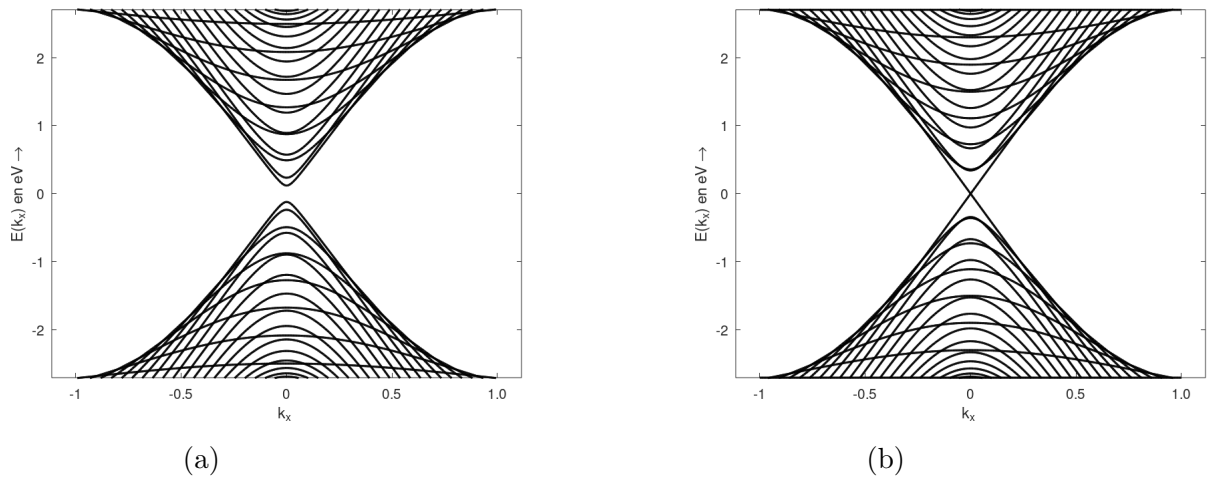


Figura 6: Propiedades electrónicas de una nanocinta armchair. a) nanocinta con 40 sitios y b) nanocinta con 41 sitios.

3. Transporte electrónico en nanocintas de grafeno

Hasta hace 20 años se creía que los cristales bidimensionales no eran termodinámicamente estables (Castro Neto *et al.* , 2009). Sin embargo, esta concepción cambió con el descubrimiento del grafeno. El grafeno, con sus propiedades extraordinarias como su alta conductividad, la relación lineal entre momento y energía, y sus características relativistas, ha transformado de manera significativa los paradigmas de la materia condensada. A pesar del éxito y el interés generado por este material, su lenta implementación en la tecnología convencional hace difícil que el grafeno se convierta en la base para construir dispositivos electrónicos, como los microprocesadores, en un futuro inmediato (Geim & Novoselov, 2007). Esto se debe a que la forma natural de implementar grafeno en dispositivos electrónicos, a través de las nanocintas de grafeno, suele presentar vacancias atómicas en sus bordes, lo que las hace irregulares. Esta irregularidad impacta significativamente en el transporte electrónico, limitando de manera considerable el transporte balístico mediante un bloqueo de Coulomb que se localiza a lo largo del dispositivo como se muestra en la Figura 7 (Bischoff *et al.* , 2015). Este fenómeno (bloqueo de Coulomb) se manifiesta cuando la energía necesaria para agregar una carga elemental a un sistema supera la energía térmica del sistema, lo que lleva a que la carga adicional no pueda ingresar al sistema.

La investigación sobre el desorden cristalino en las nanocintas de grafeno, que incluye fenómenos como las vacancias atómicas, ha sido un tema destacado en los últimos 15 años y sigue siendo relevante, ya que se busca comprender completamente

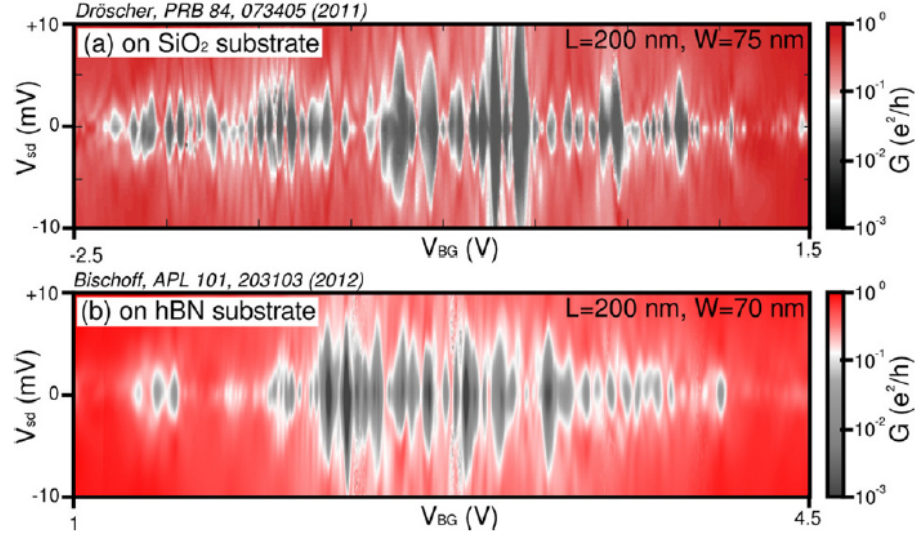


Figura 7: Comparación directa de las propiedades de transporte a baja temperatura de una cinta de nanografeno fabricada sobre (a) dióxido de silicio y (b) sobre hBN. Aparte de las diferencias microscópicas, las propiedades de transporte generales permanecen inalteradas. Figura extraída de Bischoff *et al.* (2015).

la supresión de la conductancia balística (Mucciolo & Lewenkopf, 2010; Bischoff *et al.*, 2015; Mucciolo *et al.*, 2009). Una contribución significativa se produjo en 2009, donde los autores llevaron a cabo un estudio numérico sobre el comportamiento de la conductancia en nanocintas de grafeno con desorden en los bordes y en el centro de la nanocinta (bulk). Los resultados indicaron que la conductancia se ve principalmente suprimida debido al desorden en los bordes. Además, demostraron que incluso con un desorden considerado “débil”, se afecta de manera considerable la cuantización de la conductancia (Mucciolo *et al.*, 2009). En la Figura 8, se presenta la conductancia de una nanocinta zigzag y una nanocinta armchair en color negro, donde se observa que la conductancia permanece cuantizada y sin dispersión. Sin embargo, al remover átomos de los bordes de las nanocintas, se puede notar que la cuantización de la conductancia desaparece, siendo suprimida en su totalidad. En el caso de la nanocinta zigzag, en la Figura 8-b), se muestra la conductancia en color

rojo cuando se elimina un átomo de carbono del borde de manera aleatoria, en color azul cuando se eliminan dos átomos, en verde cuando se eliminan tres átomos y en amarillo cuando se eliminan cuatro átomos. Se concluye que la conductancia se suprime considerablemente ante la presencia de imperfecciones en los bordes de una nanocinta de grafeno, perdiendo además las propiedades balísticas de transporte.

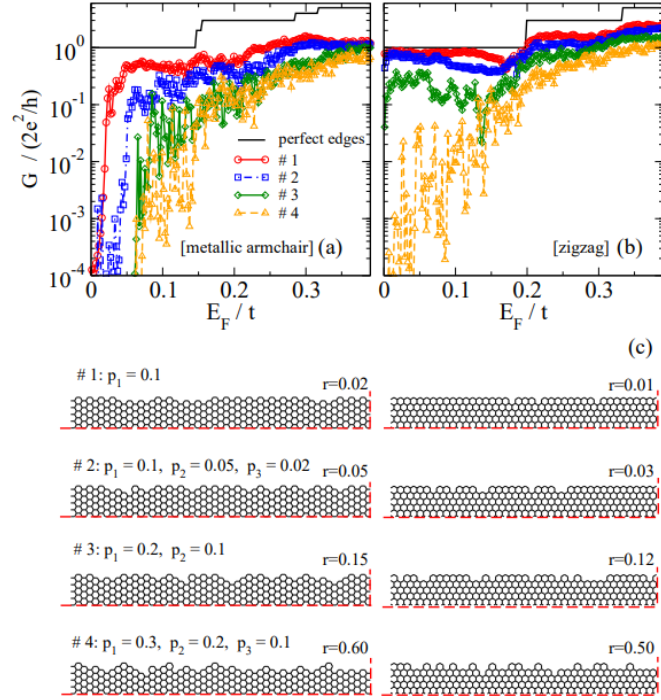


Figura 8: (a) y (b): Conductancia promedio para nanocintas de grafeno con variación en la rugosidad de los bordes (promedio sobre 10 realizaciones en línea roja, azul, verde y amarillo). Todas las nanocintas tienen la misma longitud ($L = 45$ nm) y anchos similares ($W = 4.4$ nm para la disposición armchair y $W = 4.7$ nm para la disposición en zigzag). (c) Perfiles de la rugosidad utilizados para calcular la conductancia en (a) y (b). (solo se muestran segmentos de la estructura atómica de la nanocinta). Izquierda: disposición armchair; derecha: disposición en zigzag. Figura extraída de Mucciolo *et al.* (2009).

En la literatura, se han propuesto diversas estrategias para controlar la región espacial en la cual ocurre el transporte electrónico en dispositivos de grafeno. En 2011, se propuso generar un efecto de guía de onda similar al de una fibra óptica en

nanocintas de grafeno prístinas (Williams *et al.* , 2011). El experimento involucra una “hoja” de grafeno con cuatro contactos para regular el voltaje, y mediante una diferencia de potencial, se logra el efecto de guía de onda (ver Figura 9). Regímenes de guía, OPG (azul), PNG y OPG/PNG (rosa), en función de la densidad bajo la compuerta superior (n_1) y fuera de la compuerta superior (n_2). El punto medio del diagrama es una densidad cero en las regiones 1 y 2. Simulaciones de la densidad de corriente J en los tres regímenes para índices efectivos de refracción ϵ_1 y ϵ_2 . Los ejes 'X' y 'Y' representan la escala de tamaño del dispositivo de $100 \text{ nm} \times 100 \text{ nm}$. La eficiencia de la guía es $\gamma = 0.53, 0.03$ y 0.24 ($\Omega = 0.58, 0.18$ y 0.29) en los regímenes OPG, PNG y OPG/PNG, respectivamente, donde definimos γ como la diferencia entre Ω y su valor para índices iguales, $\gamma(\epsilon_1, \epsilon_2) = \Omega(\epsilon_1, \epsilon_2) - \Omega(\epsilon_1, \epsilon_1)$. Las líneas verdes en (b-d) son líneas de densidad de corriente constante. Estos autores demostraron que la eficiencia de la guía se incrementa cuando se aplica un campo magnético perpendicular a la base de la nanocinta.

En 2012, se presentó otra propuesta para generar efectos de guías de onda en nanocintas de grafeno. En el artículo titulado “Graphene Antidot Lattice Waveguides” (Pedersen *et al.* , 2012), se propone una nanoestructura de grafeno donde una región de grafeno prístino se sitúa entre dos regiones que presentan huecos periódicos. Los resultados presentados son de gran importancia, ya que en este tipo de guías de onda se manifiesta el fenómeno de cuantización de la conductancia. En años recientes, se ha investigado el transporte electrónico en nanocintas de grafeno con líneas de defectos cristalinos. En particular, los cálculos que se realizaron mostraron que es posible lograr la polarización de valle mediante este mecanismo (Gunlycke & White, 2011). Por otro lado, los experimentos realizados por Kim *et al.* (2016) evidenciaron experimentalmente la posibilidad de crear efectos de guías de onda aplicando

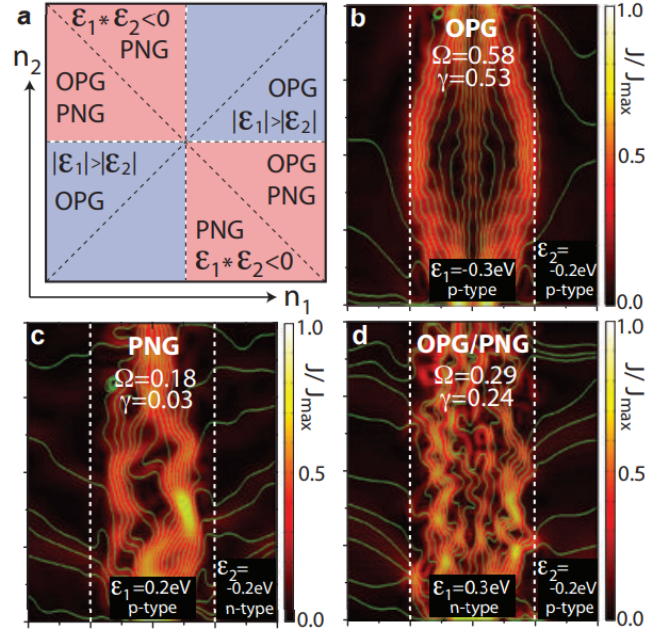


Figura 9: Simulación de una guía de onda p-n en grafeno con compuertas (explicación en texto). Figura extraída de Williams *et al.* (2011).

diferencias de potencial en “hojas” de grafeno.

En el año 2016, se abordó la influencia de tensiones y deformaciones en el grafeno sobre el transporte de carga. En particular, se investigó cómo los pliegues generados por tensiones locales pueden afectar la conductividad eléctrica y la movilidad de electrones en el material (Carrillo-Bastos *et al.*, 2016, 2014). Los pliegues tensionados, originados por diversos factores, se exploran como posibles facilitadores del transporte de carga, creando vías preferenciales para el flujo de electrones a través del grafeno. En la figura 10-a) se muestra la conductancia para diferentes ordenes de deformación tipo gaussiano con la relación de aspecto $\alpha = A/b$, donde A es la amplitud de la deformación y b el semiancho. En la figura 10-b) se muestra la densidad de estados local para una nanocinta sin deformación ($A = 0$) y con una deformación con relación de aspecto de ($A = 5a$ y $b = 10a$), donde a es la distancia entre átomos

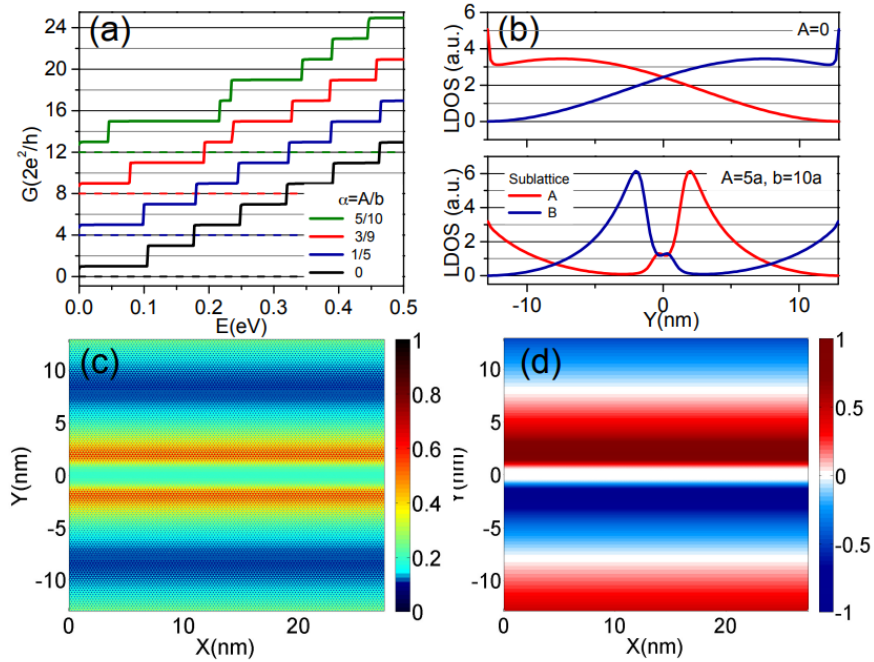


Figura 10: (a) Conductancia para una cinta ($L = 27.4 \text{ nm}$ y $W = 25.8 \text{ nm}$) con diferentes parámetros de pliegues tensionados. Las curvas están desplazadas para mayor claridad. Líneas horizontales discontinuas marcan el valor cero para una comparación adecuada. (b) Perfil de LDOS a lo largo de la cinta con paneles superiores/inferiores mostrando resultados para: $\epsilon_m = 0\% - 9.2\%$ (curvas negras a verdes en (a)), (c) LDOS total mejorado producido por el pliegue tensionado, (d) mapa de color de la polarización de subredes. Paneles (b)-(d) obtenidos en $E = 0.05 \text{ eV}$. Parámetros: $W = 27.4 \text{ nm}$, amplitud $A = 0.7 \text{ nm}$ y ancho $b = 1.4 \text{ nm}$. Figura extraída de Carrillo-Bastos *et al.* (2016).

de carbón. Las figuras c) y d) muestran la densidad de estados total a lo largo de la nanocinta y el comportamiento por subredes respectivamente. La investigación busca comprender cómo estas propiedades pueden ser aprovechadas en aplicaciones tecnológicas, desde dispositivos electrónicos flexibles hasta dispositivos de detección.

En 2018, se propuso un mecanismo adicional para generar guías de onda en nanocintas de grafeno (Mosallanejad *et al.* , 2018a). Este trabajo numérico investigó las propiedades de transporte electrónico en guías de onda curvilíneas (ver Figura 11). Los resultados son particularmente interesantes, ya que reportaron que las bandas de energía de una guía de onda dentro de una nanocinta de grafeno dependen fuertemente de la diferencia de potencial aplicado. Además, dichas bandas pueden ser modificadas variando el grosor de la guía de onda. En el caso de una guía de onda curvilínea, los niveles de conductancia se mantienen casi invariantes en comparación con una guía de onda “rectangular”; es decir, la curvatura de la guía de onda parece no afectar considerablemente los escalones en la gráfica de conductancia de la guía. En la figura 11-a) se muestra la conductancia de dos terminales G en función del nivel de Fermi para una guía de onda curvada con diferentes grados de curvatura $DC = 0, 10.2, 20.4$ y 30.6 nm. Se puede observar que para la guía de onda de grafeno recta con $DC = 0.0$ nm, para $E > 0$ la conductancia resultante puede aproximarse a $G = 1, 3, 5\frac{e^2}{h}$; mientras que para $E < 0$, la conductancia se vuelve oscilante debido a la fuerte interferencia entre los modos de entrada y retrodispersión, y siempre es menor que $G = 1\frac{e^2}{h}$. Es digno de destacar que se aplican potenciales de sitio independientes de $V_L = -0.22$ eV y $V_R = 0$ eV a los terminales izquierdo y derecho para coincidir con los modos de la guía de onda. En la figura 11-b), como ejemplo, trazamos la densidad local de estados del modo de guía de onda confinado perfectamente conductor de $G \approx 1\frac{e^2}{h}$ con $E_F = 0.03$ eV y $DC = 20.4$ nm fijos. Se puede ver claramente que el modo de guía de onda confinado solo se propaga localmente dentro de la guía de onda. La figura 11-c) muestra la coincidencia de bandas entre los terminales y la región central de dispersión para la Figura 4(a).

Dada la información recopilada en la literatura citada anteriormente, surge na-

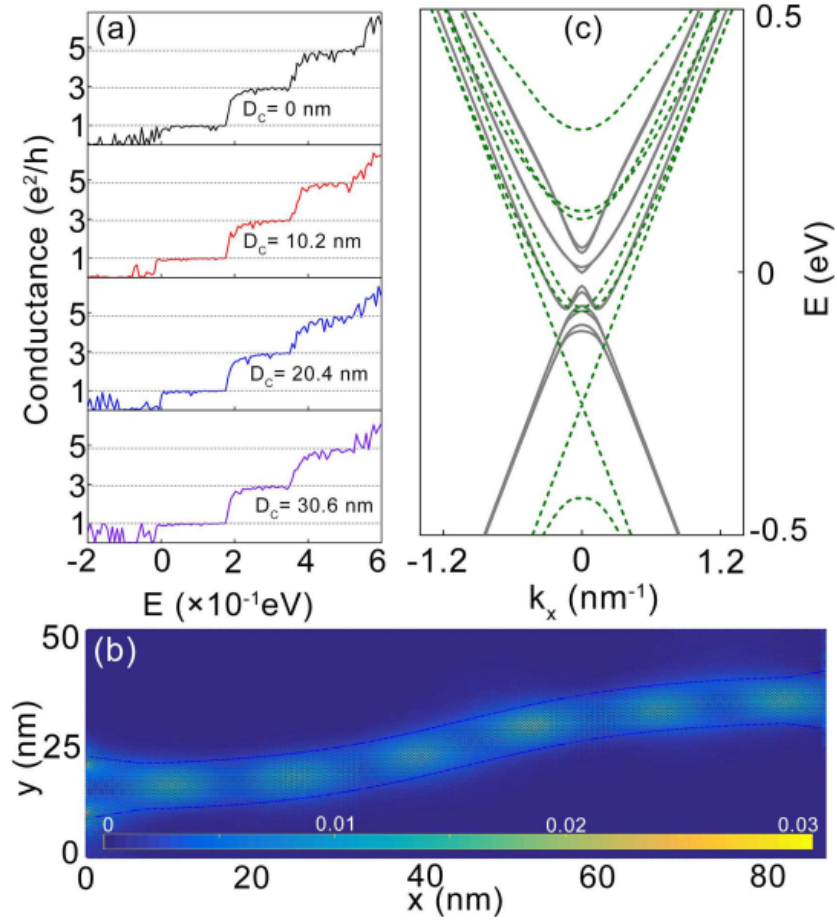


Figura 11: (a) Conductancia con dos terminales en función del nivel de Fermi para diferentes guías de onda curvadas, es decir, $D_C = 0, 10.2, 20.4,$ y $30.6 nm$. Los parámetros del sistema se eligen como $L = 80 nm, W = 50 nm, W_G = 10 nm$ y $\delta V = -0.25 eV$. (b) Distribución espacial de la densidad de estados de la guía de onda del monomodo único. (c) Coincidencia de las bandas de energía entre los contactos (líneas sólidas) para los sistemas mostrados en el panel (a). Potenciales adicionales en el sitio de $-0.22 eV$ se agregaron a los contactos para alinear las subbandas de conducción similares. Figura extraída de Mosallanejad *et al.* (2018a).

turalmente la pregunta de si los efectos de guía de onda podrían restablecer el transporte electrónico balístico en nanocintas de grafeno con bordes desordenados. En principio, estos efectos podrían confinar espacialmente el movimiento de los electrones, evitando así la dispersión. Sin embargo, hasta el momento no se ha llevado a

cabo un estudio de este tipo. Además, permanece desconocido cuál de todos los mecanismos de guías de onda sería el más efectivo para suprimir los efectos dispersivos en los bordes.

4. Formalismo de las funciones de Green

La función de Green es muy útil en el área de física ya que son herramientas matemáticas fundamentales que se utilizan para describir la propagación de partículas o campos en sistemas físicos. Por otro lado, las relaciones de Fisher-Lee (Lee & Fisher, 1981) son una serie de relaciones integrales que conectan las funciones de Green con las densidades de estados y las amplitudes de dispersión en sistemas cuánticos. Estas relaciones son útiles para comprender cómo las propiedades microscópicas de un sistema se relacionan con sus propiedades macroscópicas. Estas funciones describen cómo un sistema responde a una perturbación externa en términos de la probabilidad de transición entre diferentes estados del sistema. En este capítulo, utilizaremos esta herramienta para calcular los coeficientes de transmisión, que son indispensables para calcular el transporte electrónico en sistemas mesoscópicos.

4.1. Función de Green de una partícula

En mecánica cuántica, por lo general se está interesado en resolver la ecuación de Schrödinger (o la ecuación de Dirac) independiente del tiempo

$$[E - H] \Psi(\mathbf{r}) = 0, \tag{14}$$

donde H es el Hamiltoniano del sistema en el espacio real. La función de Green correspondiente a H se define como la solución de la ecuación diferencial que cumple

$$[E - H] G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (15)$$

La ecuación diferencial (15) tiene una función de inhomogeneidad espacial, la función delta de Dirac $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, que se define como cero cuando $r \neq r'$, e infinito cuando $r = r'$. En esta notación, la ecuación diferencial (15) toma la forma

$$[E - H] G(E) = \mathcal{I}, \quad (16)$$

donde \mathcal{I} es la identidad. En adelante, denotamos el símbolo como G , las funciones de Green y a el operador de la función de Green. En una notación conveniente, la relación entre ambas es

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = \langle \mathbf{r} | G(E) | \mathbf{r}' \rangle, \quad (17)$$

donde, si E no es un eigenvalor de H , el operador de la función de Green se puede escribir como

$$G(E) = [E - H]^{-1}. \quad (18)$$

Sin embargo, sin especificar las condiciones de frontera, la inversa de un operador diferencial no está definida de manera única. La función de Green $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$ puede verse como una función de onda en el punto \mathbf{r} resultado de una perturbación en el punto \mathbf{r}' . En términos generales, las soluciones de causalidad se refieren a la propiedad de las funciones de Green que asegura que la información y la influencia no se propaguen más rápido que la velocidad de la luz. Esto significa que un cambio en un punto del espacio-tiempo solo puede afectar a los puntos en el futuro de ese

punto, y no a los puntos en el pasado. Matemáticamente, esto se expresa a través de la condición de causalidad, que implica que la función de Green debe ser cero para argumentos negativos de tiempo ($t < 0$) cuando se calcula en el espacio de momento de energía y, además, que la función de Green tiene soporte en la región de tiempo de retardo” para $t > 0$. Esta condición garantiza que los efectos de una perturbación solo se propaguen hacia adelante en el tiempo. Estas condiciones de frontera pueden ser incluidas añadiendo o sustrayendo una cantidad imaginaria infinitesimal a la parte de la energía, lo que resulta en las siguientes ecuaciones

$$G_{R/A}(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0} [E - H \pm i\eta]^{-1} \quad (19)$$

En las siguientes secciones solo se utilizará la función de Green retardada, ya que para obtener la función de Green avanzada solo se necesita obtener el complejo conjugado de la función de Green retardada (se puede apreciar claramente en la ecuación 19).

4.2. La función de Green y la relación con los estados transmitidos

Estamos interesados en calcular la conductancia de un dispositivo mesoscópico, específicamente en nanocintas de grafeno. El formalismo de Büttiker-Landauer ofrece que podamos calcular la conductancia en términos de los coeficientes transmitidos de un cierto dispositivo, que, para nuestro caso es un conductor balístico conectado a dos terminales. Este formalismo puede manejar sistemas con un número arbitrario de terminales. Las terminales en este contexto se refieren a los contactos externos a través de los cuales la corriente fluye dentro y fuera del sistema que se está estudiando,

como electrodos en dispositivos electrónicos. Los coeficientes de transmisión pueden ser expresados en términos de las funciones de Green mediante la relación de Fisher-Lee (Fisher & Lee, 1981). En este capítulo no estamos interesados en la obtención detallada de dicho formalismo, por lo que solo expresaremos el resultado final.

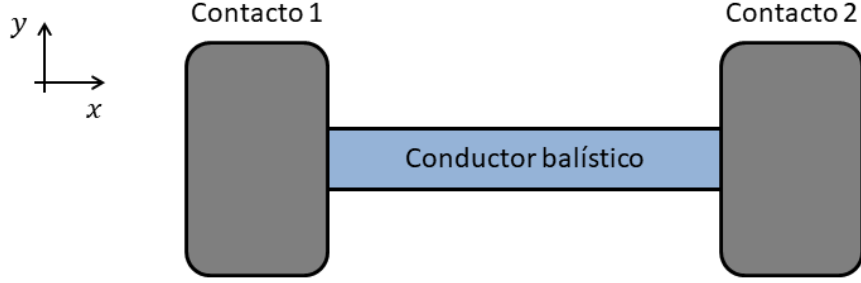


Figura 12: Conductor balístico conectado a dos grandes contactos.

Los coeficientes de transmisión entre los contactos p y q están dados por

$$T_{pq}(E) = \mathbf{Tr}[\Gamma_p G_{pq} \Gamma_q G_{pq}^\dagger], \quad (20)$$

donde \mathbf{Tr} es la traza y los elementos de matriz $\Gamma_{p,q}$ describen el acoplamiento de los contactos. Estos elementos de matriz se expresan en términos de las autoenergías Σ_p

$$\Gamma_p = i[\Sigma_p - \Sigma_p^\dagger], \quad \Gamma_q = i[\Sigma_q - \Sigma_q^\dagger]. \quad (21)$$

La función G_{pq} en la ecuación 20 corresponde a una matriz con elementos de funciones de Green $G(r_q, r_p)$, donde $r_{p/q}$ son puntos en los contactos p/q . El formalismo de Landauer es una herramienta importante en la física de la materia condensada para comprender el flujo de corriente en dispositivos nanoestructurados, particularmente en el contexto de la electrónica cuántica y la nanotecnología. Este formalismo se basa

en la idea de que la conductancia de un dispositivo electrónico está determinada por el número de canales de conducción disponibles para el transporte electrónico.

La conductancia en el formalismo de Landauer se calcula utilizando la fórmula de Landauer-Büttiker (para dos terminales), que relaciona la corriente eléctrica que fluye a través de un dispositivo con la diferencia de potencial aplicada a través de él y las características de transmisión del dispositivo. La fórmula básica es:

$$G = \frac{2e^2}{h}T(E_F), \quad (22)$$

donde G es la conductancia del dispositivo, e es la carga del electrón, h es la constante de Planck y $T(E_F)$ es la transmitancia del dispositivo en la energía de Fermi E_F .

La transmitancia T representa la probabilidad de que un electrón incidente con cierta energía E atraviese el dispositivo sin ser reflejado. Se puede calcular utilizando métodos de mecánica cuántica, como la teoría de scattering o la teoría de la matriz de transferencia.

En resumen, para calcular la conductancia en el formalismo de Landauer, primero necesitas determinar la transmitancia del dispositivo para la energía de Fermi relevante, y luego usar la fórmula de Landauer-Büttiker.

Aunado a lo anterior, con las funciones de Green, se puede determinar la densidad de estados local en la nanocinta de grafeno ("LDOS", local density of states, por sus siglas en inglés). Para calcular la densidad de estados local (LDOS) utilizando las funciones de Green, primero se necesita calcular la función de Green local $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$, que describe la probabilidad de encontrar una partícula en el punto \mathbf{r} con energía E , si se introduce una partícula en el punto \mathbf{r}' .

Una vez que se tiene la función de Green local, la densidad de estados local se puede calcular como:

$$D(\mathbf{r}, E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im Tr } G(\mathbf{r}, \mathbf{r}, E), \quad (23)$$

donde $D(\mathbf{r}, E)$ es la densidad de estados local en el punto \mathbf{r} y la energía E . Im denota la parte imaginaria, Tr denota la traza y $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}, E)$ es la función de Green local evaluada en el punto \mathbf{r} y la energía E . La función de Green local puede calcularse utilizando métodos numéricos o teóricos, dependiendo del sistema en consideración y la precisión requerida. Una vez que se obtiene $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$, se puede evaluar en el mismo punto \mathbf{r} para obtener los LDOS en ese punto y energía específicos.

4.3. Función de Green de la red

En esta sección se presenta un método numérico eficiente para calcular las funciones de Green G_{pq} . La estructura de la ecuación 20 se explicará de manera detallada para su mejor comprendimiento.

Generalmente, cuando se hace un cálculo numérico, se trabaja con sistemas discretos. La discretización de nuestro sistema consiste en una red de átomos colocados en una geometría hexagonal, es decir, grafeno que su Hamiltoniano está descrito a primeros vecinos, donde asumimos un solo orbital (el orbital π) por sitio. Dicho Hamiltoniano queda descrito como

$$H = \epsilon |\phi_i\rangle \langle \phi_i| - t_0 \sum_{\langle i,j \rangle} [|\phi_j^A\rangle \langle \phi_i^B| + h.c.], \quad (24)$$

donde $\langle i, j \rangle$ es el tuneo a primero vecinos y ϵ es la energía de sitio, en el modelo más simple del grafeno, se asume que la energía de un electrón en un átomo

de carbono en la red de grafeno es cero en relación con la energía de Fermi del material. En general, la energía de sitio es cero para este tratamiento pero puede ser diferente de cero como veremos en los siguientes capítulos. El parámetro de tuneleo lo tomaremos como $t_0 = 2.8 \text{ eV}$ para este caso, como se sabe, aproximadamente esta es la energía necesaria para que un electrón pueda atravesar una barrera de potencial en el grafeno. La función de Green suele ser calculada mediante

$$G(E) = [E - H - i\eta]^{-1}. \quad (25)$$

Sin embargo, esto es imposible debido a que H es de dimensión infinita dado que incluye contactos semi infinitos. La solución a este problema consiste en que las autoenergías de los contactos deben ser asociadas a un Hamiltoniano finito para que pueda ser calculado. Para hacer esta explicación posible, asumiremos una red cuadrada en el formalismo de amarre fuerte para después explicar cómo implementarlo en una red hexagonal como se explica en (Lewenkopf & Mucciolo, 2013). Primero hablaremos del sistema completo que puede ser dividido como

$$H = H_D + \sum_i (H_L^i + V_{LD}^i + V_{DL}^i), \quad (26)$$

donde H_D es el Hamiltoniano del dispositivo central, en otras palabras, la nanocinta, H_L^i es el Hamiltoniano del contacto i . El término V_{LD}^i describe el tuneleo entre los contactos y la nanocinta.

4.4. Autoenergías de los contactos semi infinitos

Las ecuaciones de autoenergía para los contactos semi-infinitos son importantes en la teoría de sistemas cuánticos, particularmente en el contexto de la teoría de transporte electrónico en nanodispositivos y sistemas mesoscópicos (Datta, 2005). Estas ecuaciones están relacionadas con la estructura electrónica y la densidad de estados en los contactos (canales de entrada y salida) de un dispositivo cuántico. Las ecuaciones de autoenergía se utilizan para describir cómo se comportan los electrones en los contactos.

Las ecuaciones de autoenergía se pueden expresar en términos de matrices de dispersión (S-matrices) y funciones de Green. Las funciones de Green son una herramienta fundamental en la teoría cuántica de campos y la mecánica cuántica, y se utilizan para describir la propagación de partículas a través de sistemas cuánticos.

En el contexto de contactos semi-infinitos, las ecuaciones de autoenergía describen cómo se propagan las ondas electrónicas en los contactos y cómo se reflejan o transmiten en un dispositivo cuántico. Estas ecuaciones suelen ser específicas para la geometría y la estructura electrónica del sistema que se está estudiando, por lo que la forma exacta de las ecuaciones puede variar.

Dicho esto, las ecuaciones de autoenergía a menudo se derivan a partir de la teoría de la dispersión de ondas y pueden incluir términos que representan la matriz de dispersión (S-matrix), la matriz de Hamiltoniana y las funciones de Green del sistema. El Hamiltoniano del sistema completo se puede dividir como:

$$H = H_D + \sum_i (H_L^i + H_{LD}^i + H_{DL}^i), \quad (27)$$

donde H_D es el Hamiltoniano de la red cristalina central (el dispositivo), y H_L^i es el Hamiltoniano para el contacto izquierdo (pongamos de ejemplo el contacto 1). El término H_{LD}^i describe los tuneleos entre el contacto y el dispositivo.

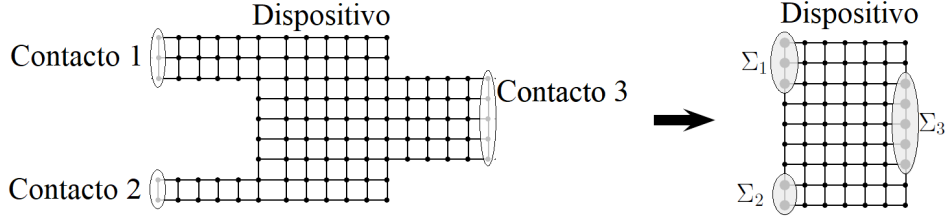


Figura 13: Los contactos también pueden ser considerados en cuenta por su autoenergía.

Por simplicidad, solo se se considerará un contacto k por ahora pese a que el formalismo es en general para varios contactos; para ejemplificar como se obtendría las autoenergías de un solo contacto. La función de Green se puede subdividir de la siguiente manera

$$\begin{pmatrix} (E \pm i\eta)I - H_L^k & V_{LD}^k \\ V_{DL}^k & (E \pm i\eta)I - H_D \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} G_L^k & G_{LD}^k \\ G_{DL}^k & G_D \end{pmatrix} = I. \quad (28)$$

La única parte de la función de Green en la que estamos interesados es G_D , la función de Green del dispositivo. A partir de la ecuación 28 se pueden extraer las siguientes ecuaciones:

$$[(E \pm i\eta)I - H_L^k]G_{LD}^k + [V_{LD}^k]G_D = 0, \quad (29)$$

$$[(E \pm i\eta)I - H_D]G_D + [V_{DL}^k]G_{DL}^k = I, \quad (30)$$

donde la ecuación (29) se puede escribir como sigue

$$G_{LD}^k = -g_L^k V_{LD}^k G_D, \quad (31)$$

donde $g_L^k = [(E \pm i\eta)I - H_L^k]^{-1}$ es la función de Green para un contacto semi infinito aislado. Sustituyendo G_{LD}^k en la ecuación 30, podemos encontrar lo siguiente

$$G_D = \left[(E + i\eta)I - H_D - V_{LD}^{k\dagger} g_L^k V_{LD}^k \right]^{-1}, \quad (32)$$

donde se aplicó la relación $V_{DL}^k = V_{LD}^{k\dagger}$. El contacto semi infinito se tiene en cuenta a través del término $V_{LD}^{k\dagger} g_L^k V_{LD}^k$, el cual debe identificarse con la autoenergía Σ_k del contacto k (ver Figura 13):

$$\Sigma_k = V_{LD}^{k\dagger} g_L^k V_{LD}^k. \quad (33)$$

Los efectos de diferentes contactos independientes son aditivos, por lo que podemos encontrar la función de Green a partir de:

$$G_D = \left[(E + i\eta)I + H_D - \sum_k \Sigma_k \right]^{-1} \quad (34)$$

Puede parecer que el problema simplemente ha cambiado dado que el cálculo de g_L^k implica una inversión de una matriz de dimensión infinita. Sin embargo, dado que estamos utilizando el modelo a primeros vecinos, todos los elementos de matriz de acoplamiento V_{LD}^k son cero, excepto aquellos sitios vecinos al dispositivo. En consecuencia, solo se necesita la función de Green entre puntos de la superficie del contacto, es decir, $(g_L^k)_{11}$.

Después de todo, el dispositivo central consta de F sitios en la red y todas las

matrices de la ecuación 34 tienen una dimensión finita de $F \times F$. En principio, ahora podemos calcular la función de Green invirtiendo la matriz de dimensión $F \times F$. Sin embargo, a medida que el tamaño del sistema (es decir, el número de sitios en la red) aumenta, esta operación se vuelve extremadamente costosa en términos de tiempo computacional.

4.5. Función de Green recursiva

La función Green recursiva es una técnica utilizada en la teoría de la función de Green para calcular la función de Green de un sistema cuántico en términos de iteraciones. Imaginemos que tenemos un sistema cuántico representado por un Hamiltoniano H y una función de Green G que describe la respuesta del sistema a una perturbación. La función de Green recursiva se calcula a través de una serie de iteraciones y se relaciona con la matriz de Green G y la matriz del propagador P .

En lugar de evaluar la función de Green total de una vez, la red del dispositivo se divide en varias secciones. Suponiendo que se conoce la función de Green de cada una de estas secciones, se fusionan empleando la ecuación de Dyson (ver, por ejemplo Datta (1995))

$$G = g + gVG. \quad (35)$$

En esta ecuación, g es la función de Green del sistema no interactuante, V describe el hopping (tuneleo) entre las secciones, mientras que G es la función de Green que queremos encontrar (ver Figura 14). A continuación explicaremos brevemente cómo se pueden conectar dos secciones aisladas utilizando la ecuación de Dyson para obtener la función de Green del sistema conectado.

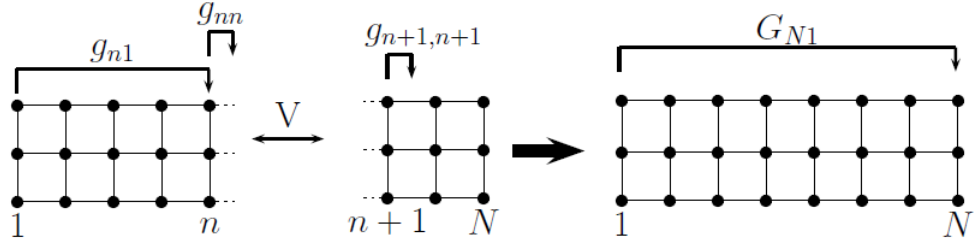


Figura 14: Esquema de dos secciones aisladas que se conectan con la ayuda de la ecuación de Dyson para obtener la función de Green del sistema conectado.

Supongamos que conocemos la función de Green de los sistemas independientes g_{n1} , g_{nn} y $g_{n+1,n+1}$. La función de Green del sistema acoplado que uno desea obtener se denota como G_{N1} . Para obtener G_{N1} , proyectamos la ecuación de Dyson entre las columnas N y 1 :

$$G_{N1} = \langle N|G|1 \rangle \quad (36a)$$

$$= \langle N|g|1 \rangle + \sum_{|\alpha\rangle, |\beta\rangle} \langle N|g|\alpha\rangle \langle \alpha|V|\beta\rangle \langle \beta|G|1 \rangle \quad (36b)$$

$$= \langle N|g|n+1\rangle \langle n+1|V|n\rangle \langle n|G|1 \rangle \quad (36c)$$

$$= g_{N,n+1} V_{n+1,n} G_{n1} \quad (36d)$$

En la ecuación (36b) se han incluido conjuntos completos de estados de los sitios de la red $|\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$. Al incluir estos conjuntos completos, se tienen en cuenta todos los estados posibles y garantizan una descripción completa del sistema. También, hemos considerado el hecho de que los elementos de tuneo V son diferentes de cero solo entre las columnas n y $n+1$, debido a que estamos considerando únicamente tuneos entre los vecinos más cercanos. Además, los términos g_{N1} y g_{Nn} son cero dado que g solo está definido para las secciones no conectadas.

Para determinar la sección desconocida G_{n1} , la ecuación de Dyson se proyecta nuevamente entre las columnas de sitio apropiadas. Este procedimiento se repite hasta obtener un conjunto de ecuaciones cerradas. En este ejemplo, se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$G_{n1} = g_{n1} + g_{nn}V_{n,n+1}G_{n+1,1}, \quad (37a)$$

$$G_{n+1,1} = g_{n+1,n+1}V_{n+1,n}G_{n,1}. \quad (37b)$$

Estas ecuaciones nos conducen a lo siguiente

$$G_{n1} = [I - g_{nn}V_{n,n+1}g_{n+1,n+1}V_{n+1,n}]^{-1} g_{n1}. \quad (38)$$

Si G_{n1} se sustituye en la ecuación (36d), obtenemos una expresión para G_{N1} la cual solo depende de la función de Green de los sistemas aislados.

La implementación de la función de Green en una red cristalina es un tema complejo y depende de la naturaleza específica del sistema y del método numérico que se esté utilizando. Sin embargo, al poner ciertos elementos de tuneo al cero energético, se obtiene la llamada red tipo ladrillo, como se muestra en la Figura 15. Esta red tiene la misma topología que la red tipo hexagonal pero mantiene una forma “cuadrada”. El método anterior puede implementarse de manera sencilla para cálculos de grafeno simplemente poniendo algunos elementos de tuneo en la matriz V a cero.

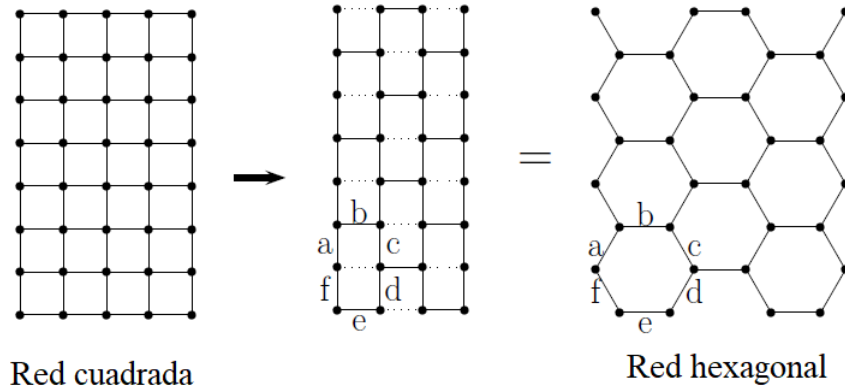


Figura 15: La red hexagonal (o red honeycomb) se puede obtener al establecer ciertos elementos de tunelamiento a cero.

5. Efectos de guías de onda en nanocintas de grafeno

Una de las características más interesantes de la fotónica y la optoelectrónica es sin duda la capacidad de sintonizar frecuencias ópticas en guías de onda como las fibras ópticas. Este precepto motiva a numerables investigaciones para generar guías de onda en nanocintas de grafeno modificando los canales naturales de conductancia que se consigue controlando su nivel de Fermi mediante diferentes mecanismos físicos como campos electromagnéticos. En este capítulo se presentan los resultados de transporte electrónico en nanocintas de grafeno zigzag con deformaciones y campos escalares. La conductancia se obtiene mediante el formalismo de las funciones de Green mencionadas en el capítulo 4. Se considera que las nanocintas están suspendidas por lo que serán nanocintas perfectas sin efectos dispersivos. La deformación que se aplica será de geometría gaussiana y los campos escalares son: potencial cuadrado, secante hiperbólica y un potencial bipolar compuesto de un potencial secante hiperbólico atractivo y uno repulsivo. Los potenciales escalares se definen por que

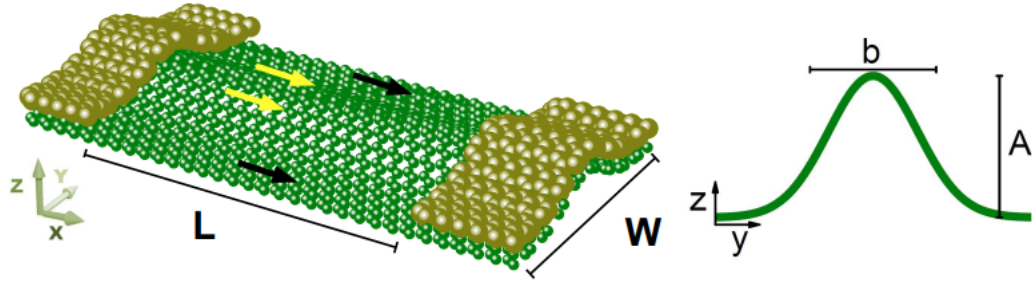


Figura 16: Diagrama esquemático de una nanocinta zigzag con deformación gaussiana de longitud L y ancho W conectada a dos contactos. Figura reproducida con permiso Carrillo-Bastos *et al.* (2016) 2016, Physical Review B.

tienen un valor numérico en cada punto de un determinado espacio, en este caso, se considera un campo escalar como la modificación de la energía de sitio en los átomos de carbono de la nanocinta mediante las funciones mencionadas. La idea del presente trabajo es crear efectos de guías de onda en las nanocintas de grafeno aplicando estos mecanismos y evaluar sus efectos en el material.

5.1. Deformación gaussiana

Para ilustrar el efecto que genera una deformación en la conductancia, consideremos una distorsión gaussiana de la forma

$$h(y_i) = Ae^{-\frac{(y_i - y_0)^2}{\alpha^2}}, \quad (39)$$

donde A es una constante, α es el semiancho de la gaussiana y $y_0 = W/2$. La deformación se extiende a lo largo de la geometría cristalina zigzag y se extiende hasta los contactos como se muestra en la Figura 16. Utilizando la aproximación de

amarre fuerte, podemos escribir el Hamiltoniano para este sistema como sigue

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} \left[U_i c_i^\dagger c_i - t_{ij} c_i^\dagger c_j \right] + h.c., \quad (40)$$

donde el primer término refiere a la energía de sitio de los átomos, el operador c_i^\dagger (c_i) crea (aniquila) una partícula en el i -ésimo sitio y $t_{ij} = t_0 \exp[-\beta(l_{ij}/a - 1)]$ es la energía asociada al tuneo modificado entre los sitios vecinos inmediatos i y j (Carrillo-Bastos *et al.*, 2014, 2016; Castro Neto *et al.*, 2009), donde $t_0 = -2.8$ eV es el parámetro de tuneo en ausencia de deformaciones, $a = 0.142$ nm es la distancia carbón-carbón, y $\beta = |\partial \log t_0 / \partial \log a| \simeq 3$ es el parámetro de Grüneisen para el grafeno. La distancia interatómica modificada está dada por

$$l_{ij} = a + \frac{\varepsilon_{yy}}{a} y_{ij}^2, \quad (41)$$

donde $\varepsilon_{yy} = \partial_y h(y) \partial_y h(y)$ es el tensor de deformación y y_{ij} es la distancia proyectada entre los sitios i y j en la dirección y .

En la Figura 17-(a) se muestra la conductancia contra la energía, donde la línea naranja corresponde a una deformación gaussiana en una nanocinta zigzag y la línea negra a trozos corresponde a la conductancia en ausencia de deformación. La conductancia de una nanocinta prístina muestra la cuantización típica de la conductancia para una nanocinta zigzag descrita por $G(E) = G(2e^2/\hbar) = 2n + 1$, donde $n \in \mathbb{N}$. La primer meseta de conductancia representa dos canales balísticos (uno por espín) debido a los estados de borde que se pueden observar en la estructura de bandas, mientras que la segunda meseta presenta seis canales. Cuando la deformación gaussiana está presente, se observa una disminución del ancho en energía de la primera

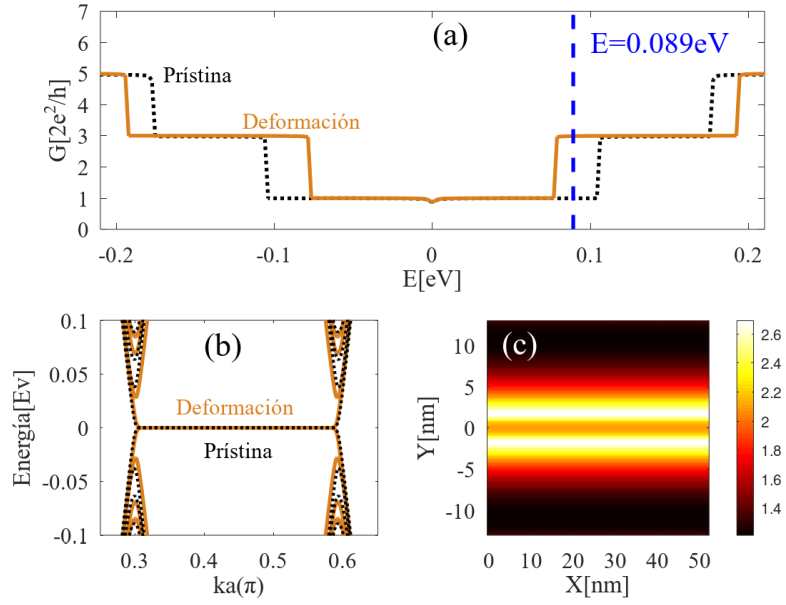


Figura 17: a) Conductancia contra energía para una guía de onda con una deformación gaussiana (color naranja) y para una nanocinta prístina (línea negra punteada), b) estructura de bandas, c) densidad local de estados (LDOS) Parámetros: $W = 54.8 \text{ nm}$, amplitud $A = 0.7 \text{ nm}$, y ancho $\alpha = 1.4 \text{ nm}$.

meseta y un incremento en el ancho de la segunda meseta; este comportamiento en los canales de la conductancia son congruentes con lo que se muestra en su espectro de energías (Fig. 17-(b)). En la Figura 17-(c) se muestra la densidad de estados local (LDOS, por sus siglas en inglés) para una nanocinta *zigzag* (ZGNR, por sus siglas en inglés) en presencia de una deformación gaussiana de amplitud A y ancho α .

En la Figura (18) se muestra la conductancia para diferentes valores de A y un ancho α constante. Las curvas muestran los resultados para ZGNR de 488 sitios atómicos de largo que corresponde a $L = 54.8 \text{ nm}$ y 244 sitios atómicos de ancho, correspondientes a $W = 25.8 \text{ nm}$. La línea punteada negra corresponde a la conductancia en ausencia de deformación, exhibiendo la forma escalonada usual debido a un confinamiento transversal. Conforme A aumenta, la segunda meseta de conduc-

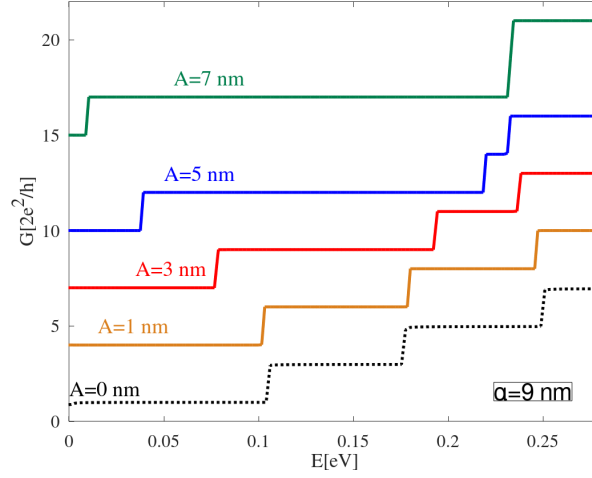


Figura 18: Conductancia (G) para diferentes valores de amplitud, $A(1, 3, 5, 7 \text{ nm})$, correspondientes a los valores de estiramiento de 0.45 %, 4.08 %, 11.35 %, y 22.25 % y ancho fijo $\alpha = 9 \text{ nm}$. La línea punteada representa al sistema en ausencia de deformación.

tancia se desplaza a energías más bajas y se vuelve más ancha. El incremento en el ancho se produce por una transferencia espectral de otras energías y su aparición a bajas energías representa un aumento en la conductancia; esto es comparable con los efectos de las deformaciones uniaxiales estudiadas por Carrillo-Bastos *et al.* (2016).

5.2. Pozo de potencial cuadrado

Consideremos el caso donde se modifica la energía de sitio y el tuneo permanece constante. Como primer caso se implementará un potencial escalar cuadrado como se muestra en la ecuación (42) e ilustrativamente en la figura (19)

$$U_i = \begin{cases} 0 & \text{si } -W/2 \leq y_i \leq -W_2/2, \\ -u_0 & \text{si } -W_2/2 < y_i < W_2/2, \\ 0 & \text{si } W_2/2 \leq y_i \leq W/2, \end{cases} \quad (42)$$

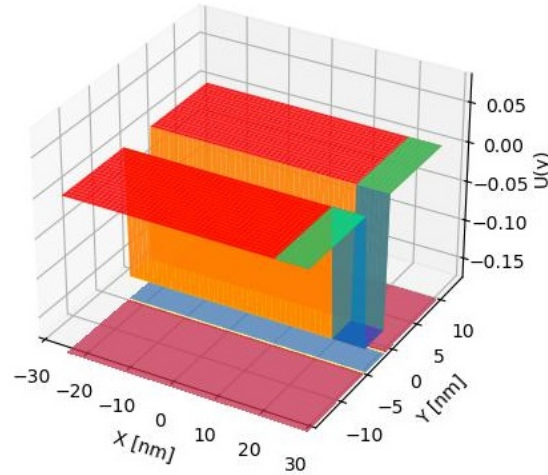


Figura 19: Imagen representativa de la forma del potencial tipo pozo cuadrado.

En la Figura 20-(a) se muestra la conductancia para este potencial abrupto inducido en una nanocinta zigzag. El potencial tiene una profundidad de $u_0 = 0.17t$ y un ancho de $W_1 = 40a$. La línea naranja continua representa la conductancia para un electrón que se propaga por una nanocinta zigzag en presencia del potencial descrito anteriormente. La línea negra punteada representa el perfil de la conductancia cuando el potencial es nulo, es decir, representa el caso de partícula libre en el grafeno. Al ser un potencial atractivo, éste baja de energía los estados y los confina en la región central del potencial, ese efecto se ve reflejado en una meseta de conductancia entre $-0.01 \text{ eV} < E < 0 \text{ eV}$. Además, este tipo de potencial ofrece nuevos canales de transmisión a bajas energías en comparación del caso prístino, como se observa en la meseta en el rango de energía $-0.055 \text{ eV} < E < -0.01 \text{ eV}$. Por otro lado, para energías positivas la primera meseta presenta una conductancia de $G(E) = 3$ entre los rangos de energía de $0 \text{ eV} < E < 0.045 \text{ eV}$. En la Figura 20-(b) se muestra la estructura de bandas de la guía de onda (línea naranja), mientras que la línea negra punteada es la estructura de bandas del caso prístino. Los canales de conductancia se correlacionan directamente con las pendientes positivas de la estructura de bandas

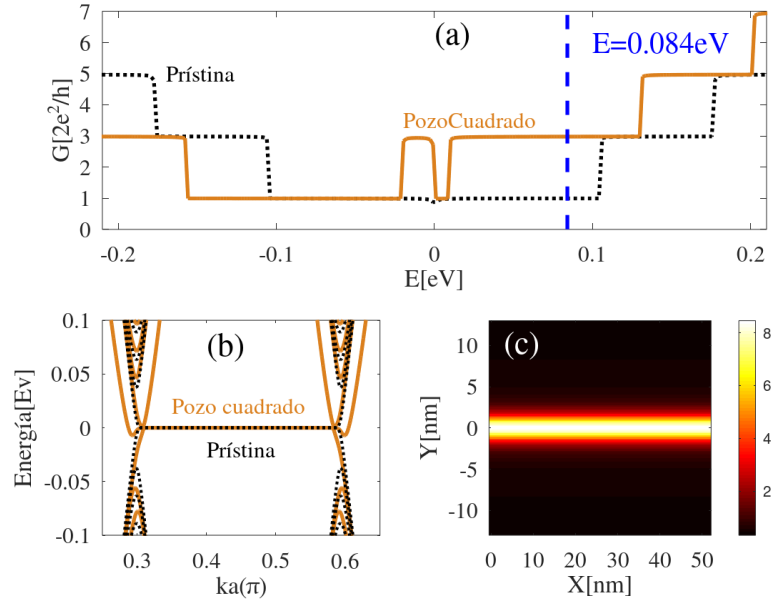


Figura 20: (a) Conductancia contra energía para una guía de onda con un potencial cuadrado atractivo (color naranja) y para una nanocinta prístina (línea negra punteada). (b) Estructura de bandas para una nanocinta zigzag en presencia de un potencial cuadrado atractivo (color naranja) y una nanocinta prístina (color negro punteado). (c) Distribución espacial de la densidad de estados total en presencia del potencial cuadrado atractivo a una energía $E = 0.084 \text{ eV}$. Los parámetros se muestran en el texto.

a una energía dada y aquí se ilustran en conjunto para una mayor apreciación. Por último, en la Figura 20-(c) se muestra la densidad de estados local (*LDOS* por sus siglas en inglés) a la energía marcada por una línea vertical azul en la Figura 20-(a). Estos cálculos demuestran que este mecanismo ofrece efectos de confinamiento en las nanocintas zigzag.

5.3. Potencial secante hiperbólico

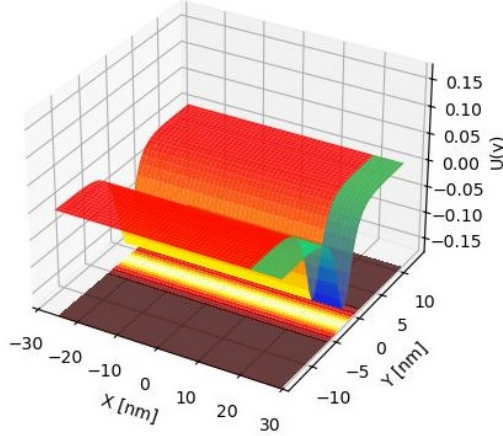


Figura 21: Imagen representativa de la forma del potencial tipo secante hiperbólico.

En esta sección consideramos un potencial $V(x) = -u_0 \operatorname{sech}\left[\frac{(y_i-d)}{W_2}\right]$ como se muestra gráficamente en la figura (21), donde $u_0 = 0.17t$ es la amplitud del potencial, $W_2 = 6.73a$ es el ancho y está centrado en el ancho de la nanocinta ($d = 0$). En la Figura 22-(a) se muestra la conductancia en función de la energía para una guía de onda con un potencial secante hiperbólico $\operatorname{sech}(y)$. Dada la similitud en el ancho y amplitud de este potencial y el potencial cuadrado, es de esperar un comportamiento similar en la conductancia. Dado que este potencial presenta un perfil más suave en comparación con el potencial cuadrado, la conductancia solo presenta pequeños cambios en la primera meseta que se encuentra alrededor del cero de energía, la cuál se ve reducida en su ancho de energías. Otra característica que es el LDOS, el potencial cuadrado y el potencial $\operatorname{sech}(y)$ comparten el mismo valor de energía en el que se concentran los estados como se muestra en la Figura 22-(c).

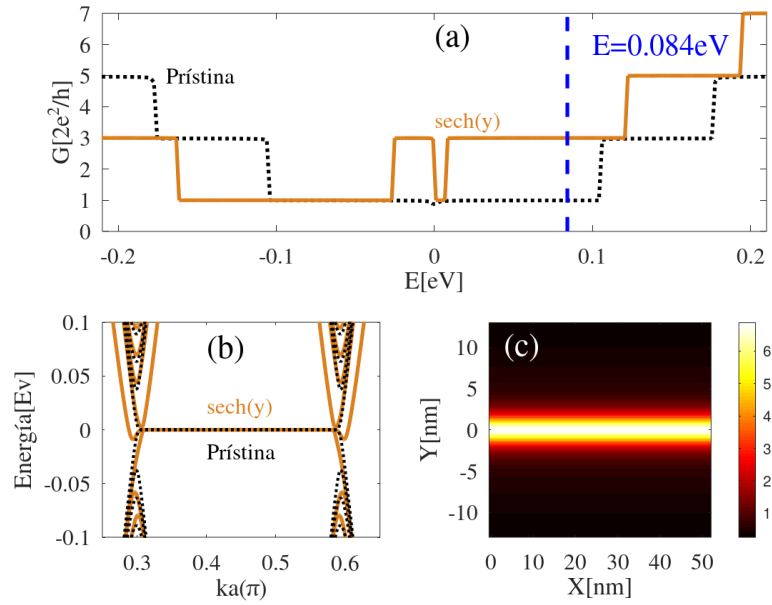


Figura 22: Conductancia en una guía de onda con un potencial $sech(y)$ (color naranja) y para una nanocinta prístina (línea negra punteada). (b) Estructura de bandas para una nanocinta zigzag en presencia de un potencial $sech(y)$ atractivo (color naranja) y una nanocinta prístina (color negro punteado). (c) Distribución espacial de la densidad de estados total en presencia del potencial $sech(y)$ atractivo a una energía $E = 0.084$ eV. Los parámetros se describen en el texto.

5.4. Potencial bipolar

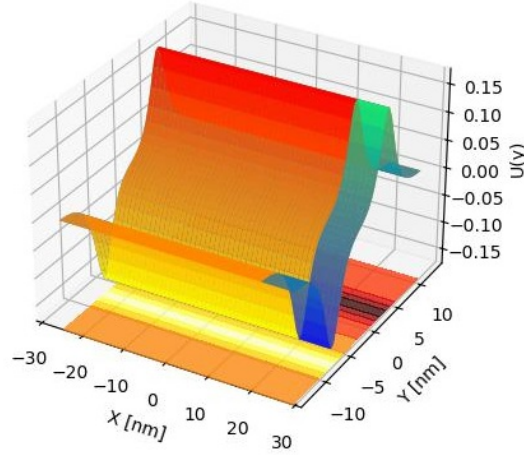


Figura 23: Imagen representativa de la forma del potencial bipolar.

En esta sección consideramos un potencial como se muestra en la figura 23 descrito como,

$$U(y_i) = -u_1 \operatorname{sech} \left[\frac{(y_i + d_1)}{W_2} \right] + u_2 \operatorname{sech} \left[\frac{(y_i - d_2)}{W_2} \right], \quad (43)$$

en el cual $u_1 = u_2 = 0.17t$ es la amplitud de los potenciales, $d_1 = d_2 = 26.69a$ es el desplazamiento de los potenciales respecto al centro geométrico del ancho de la nanocinta y $W_2 = 6.73a$ es el ancho de los potenciales. Lo interesante de este potencial es que tiene pozos y barreras, lo cual implica que coexisten resonancias y estados ligados. En la Figura 24-(a) se muestra el comportamiento de la conductancia en presencia del potencial bipolar (línea naranja), también se presenta la conductancia en ausencia del potencial (línea negra punteada). En este espectro podemos observar un comportamiento simétrico en la conductancia respecto al cero de energía. Sin embargo, como en los casos anteriores, esta guía de onda modifica las mesetas de conductancia; la primera meseta disminuye su ancho mientras que la segunda meseta aumenta la anchura de la energía. Además, un comportamiento peculiar en esta guía

de onda es la aparición de nuevos canales a bajas energías con $G(E) = 5$ que se encuentran entre el rango de energías de $-0.04 < E < 0.025$. Este comportamiento puede explicarse por dos modificaciones generales en el espectro de energía en cada valle (donde $G(E) = 5$). Primero, hay una modificación de la concavidad en algunas líneas del espectro, y segundo, hay un desplazamiento de estados hacia energías bajas respecto al espectro prístino. Por lo tanto, estas pequeñas modificaciones en pequeños intervalos de energía aumentan la conductancia en la nanocinta (ver Figura 24-(b)). Además, podemos observar mesetas con $G(E) = 3$ que han incrementado su ancho de energía, por lo tanto, estas mesetas tienen canales de conductancia adicionales debido a los modos de propagación de las guías de onda. Por consiguiente, para estimar un valor de energía asociado a estos modos extra (uno o más por valle mostrado en la estructura de bandas), se realizó un barrido de energía para analizar el LDOS en el intervalo en el que la meseta tiene el valor de $G(E) = 3$, y así, encontrar el valor de energía en el que el LDOS se concentra en la nanocinta como se observa en la Figura 24-(c).

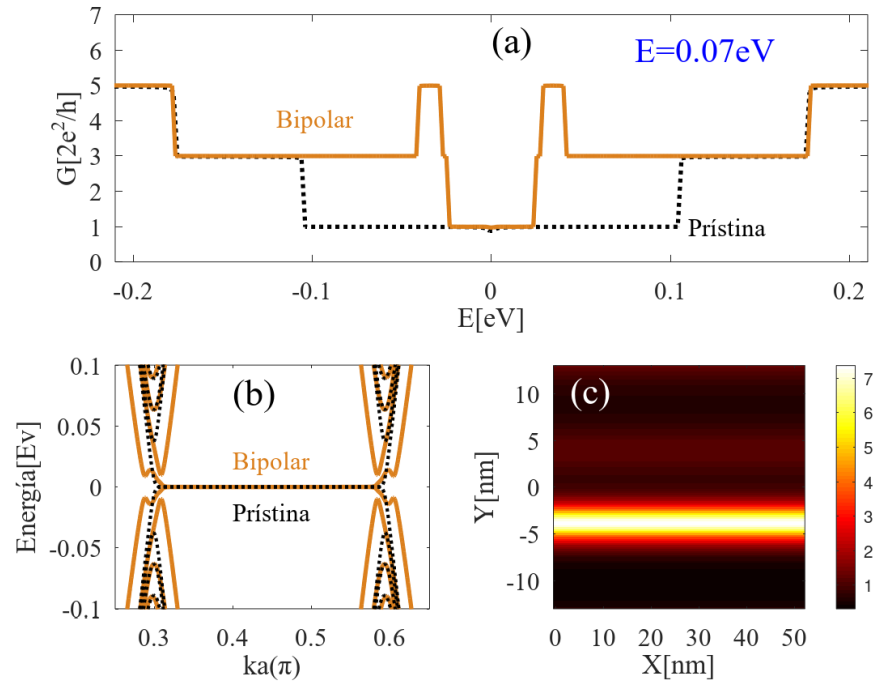


Figura 24: Conductancia contra energía para una guía de onda con un potencial bipolar (compuesto por un pozo y una barrera) (color naranja) y para una nanocinta prístina (línea negra punteada). (b) Estructura de bandas para una nanocinta zigzag en presencia de un potencial bipolar (color naranja) y una nanocinta prístina (color negro punteado). (c) Distribución espacial de la densidad de estados total en presencia del potencial bipolar a una energía $E = 0.07 \text{ eV}$.

6. Defectos de borde en nanocintas de grafeno

Experimentalmente, cortar una hoja de grafeno para crear una nanocinta siempre produce una rugosidad en los bordes debido a la técnica de grabado Bischoff *et al.* (2015). Todos los bordes de grafeno observados experimentalmente contienen estos defectos locales y se atribuye a ésto la supresión de las propiedades electrónicas del material. En la literatura se encuentran diversos trabajos experimentales (Li *et al.* , 2008; Kobayashi *et al.* , 2006; Han *et al.* , 2007) y teóricos (Mucciolo *et al.* , 2009; Mucciolo & Lewenkopf, 2010; Bischoff *et al.* , 2015; Munoz-Rojas *et al.* , 2006; Areshkin *et al.* , 2007; Gunlycke *et al.* , 2007; Lherbier *et al.* , 2008; Evaldsson *et al.* , 2008; Li & Lu, 2008; Martin & Blanter, 2009) donde se investiga el efecto de la rugosidad en los bordes en grafeno. En este capítulo estudiaremos la influencia del desorden de borde en nanocintas de grafeno zigzag en presencia de guías de onda.

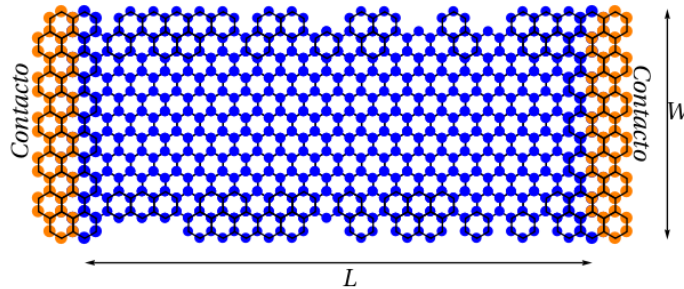


Figura 25: Diagrama esquemático de una nanocinta zigzag de longitud L y ancho W conectado a los reservorios (naranja). La región central (azul) representa la zona donde se aplica el desorden de borde.

Consideremos una ZGNR como el que se muestra en la Figura 25 donde introducimos desorden de borde en la región central L . Para aplicar este tipo de rugosidad se remueven átomos aleatoriamente de las orillas con cierta probabilidad como lo realiza Mucciolo *et al.* (2009).

El desorden de borde es caracterizado por dos parámetros: la profundidad d y la probabilidad de remover un átomo P_k . La profundidad describe el número de átomos que se pueden remover desde los más externos a los más internos.

La profundidad de desorden para una nanocinta zigzag se define como el número de cadenas afectadas por el desorden, es decir, $d = 1$ si se remueve un átomo, $d = 2$ si se remueven dos átomos y así sucesivamente. La probabilidad P_k se refiere a la probabilidad de remover un átomo de la celda unitaria iniciando desde los átomos más externos hacia los más internos.

6.1. Impacto del desorden de borde en la conductancia

La Figura 26 muestra la conductancia de una nanocinta zigzag con desorden y en ausencia de desorden de borde para un caso particular. La principal característica es que la conductancia decrece y pierde la cuantización de los canales cuando el desorden de borde está presente. Esto es lógico por que los electrones se dispersan en los defectos, los cuales incrementan la resistividad. Además, existen fluctuaciones en la conductancia que se originan por el esparcimiento coherente de las vacancias. La conductancia también depende de la posición relativa de los dispersores provocando que las fluctuaciones en la conductancia de una muestra a otra cambie, además dichas fluctuaciones son del orden de $\sim (e^2/h)$ (Datta, 1995). Ya que estamos interesados en un comportamiento general del desorden de borde, emplearemos un promedio sobre diferentes configuraciones de desorden con el fin de reducir dichas fluctuaciones. En la Figura 27 se muestra el promedio $\langle G \rangle$ (panel (a)) y la desviación estándar σ_G (panel(b)) de la conductancia para una nanocinta zigzag a una energía fija $E = 0.07 eV$ y longitud $L = 54.8 nm$. En el panel (a) se muestra que al realizar un

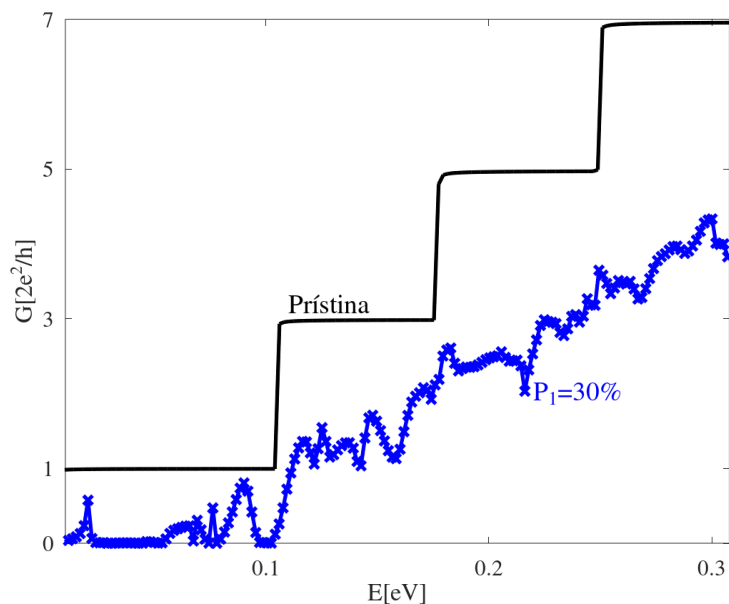
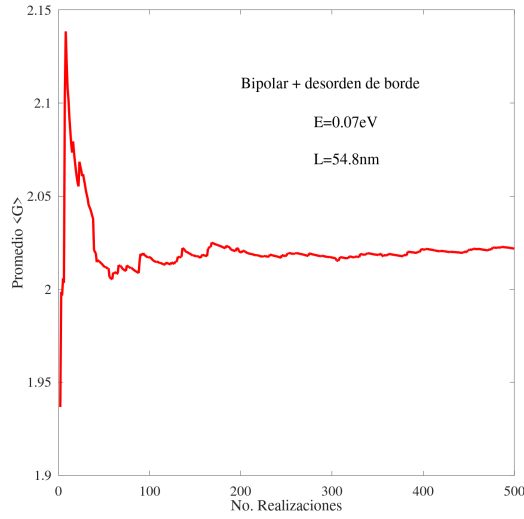
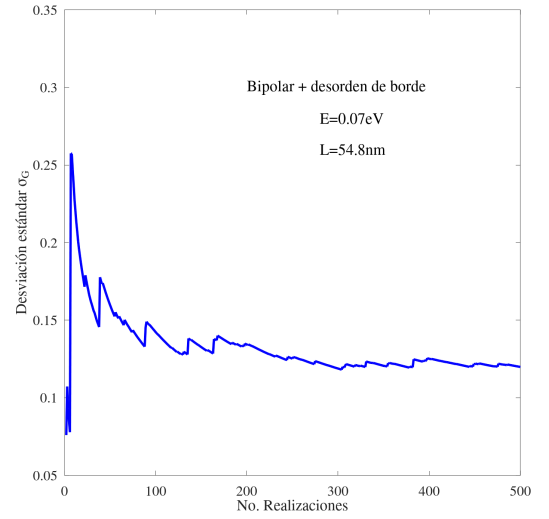


Figura 26: Conductancia de una nanocinta zigzag (línea continua negra) de ancho $W = 25.8 \text{ nm}$ y largo $L = 54.8 \text{ nm}$, y con 30% de desorden removiendo un solo átomo de los bordes (línea azul).

promedio sobre la conductancia, a partir de 50 realizaciones, las fluctuaciones en los valores de la conductancia varían alrededor de magnitudes del orden de 10^{-2} , esto significa que a partir de ese número de realizaciones el cambio en el promedio de la conductancia no será tan perceptible. Por completez, en el panel (b) se muestra la desviación estándar de la conductancia mediante 500 realizaciones. En ésta se muestra la disminución de la dispersión de los valores de la conductancia conforme aumentan las realizaciones, donde se puede observar que la variación de los datos se mantiene estable aproximadamente a partir a las 100 realizaciones. A partir de este análisis, solo los resultados sobresalientes de este trabajo del promedio de la conductancia se presentarán sobre 100 realizaciones, otros resultados serán con menos realizaciones debido al tiempo de cómputo que se requiere, pero cumplen con la función de ilustrar el efecto del desorden de borde.



(a) Promedio $\langle G \rangle$ como función del número de realizaciones para una nanocinta zigzag bajo un potencial bipolar con defectos de borde ($L = 54.8 \text{ nm}$ y $W = 25.8 \text{ nm}$) a una energía fija $E = 0.07 \text{ eV}$.



(b) Desviación estándar promedio de la conductancia como función del número de realizaciones para una nanocinta zigzag bajo un potencial bipolar con defectos de borde ($L = 54.8 \text{ nm}$ y $W = 25.8 \text{ nm}$) a una energía fija $E = 0.07 \text{ eV}$.

Figura 27: Promedio y desviación estándar de la conductancia para una nanocinta zigzag en presencia de un potencial bipolar en función del número de realizaciones.

En la Figura 28 se muestra la conductancia promedio sobre 50 realizaciones en función de la energía para nanocintas con distintos tipos de desorden. La nanocinta tiene un largo $L = 54.8 \text{ nm}$ y ancho $W = 25.8 \text{ nm}$. La gráfica muestra la conductancia para tres casos diferentes de desorden, $P_1 = 1\%$, $P_1 = 5\%$, $P_1 = 30\%$, donde $P_1 = 1\%$ es la probabilidad de remover aleatoriamente un átomo de carbono de los bordes con probabilidad del 1%, $P_1 = 5\%$ es la probabilidad de remover un átomo del 5% y $P_1 = 30\%$ de remover un átomo con probabilidad del 30%. Para porcentajes pequeños de desorden la conductancia casi no se ve afectada. Las mesetas solo se desplazan un poco hacia abajo y el comportamiento de los canales se mantienen como el caso prístino aparentemente. Para mayor rugosidad la conductancia se reduce

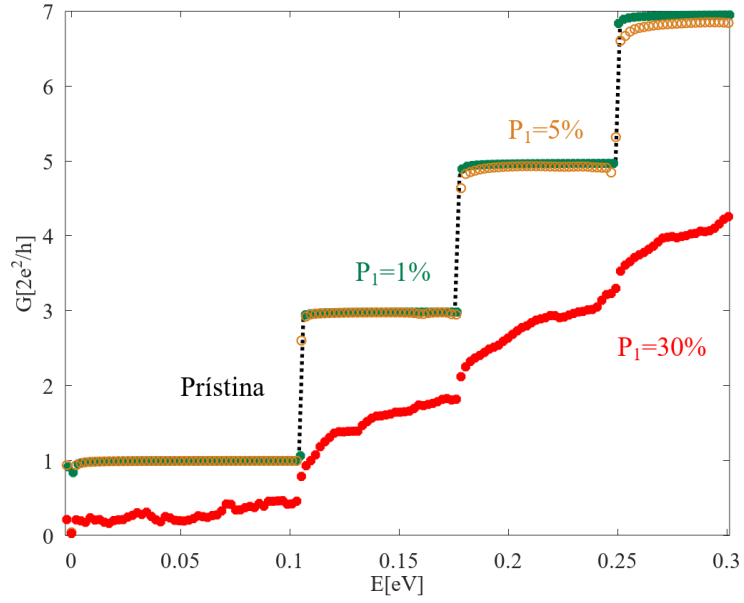


Figura 28: Conductancia promedio para diferentes probabilidades de remover un átomo aleatorio de los bordes, $P_1 = 1\%$ en color verde, $P_1 = 5\%$ en color naranja, $P_1 = 30\%$ en color rojo y el caso prístino en línea negra punteada.

considerablemente y además la cuantización de la conductancia se desaparece. Por otro lado, se sabe que existen estados localizados que se propagan por los bordes de la nanocinta, estos estados son los primeros en suprimirse y eso se ve reflejado en la conductancia alrededor de todo el rango de energía. Además, para alto porcentaje de rugosidad la primer meseta baja su conductancia a cero para bajas energías. Esto significa que se genera un gap de conductancia y la nanocinta pasa de ser metálica a semiconductor. Esta es una característica interesante para aplicaciones en electrónica. Hasta ahora, solo se ha mostrado la influencia del desorden de borde removiendo un solo átomo aleatoriamente con cierta probabilidad. En la Figura 29 se muestra la conductancia para nanocintas zigzag con diferentes profundidades de desorden promediadas sobre cinco realizaciones por cuestiones de tiempo de cómputo. En este caso queremos comparar las nanocintas en el que el desorden está restringido en los

bordes con aquellas en donde el desorden se extiende al bulto. Los resultados que se exhiben en la Figura 29 muestran que, cuando la profundidad de los átomos removidos incrementa, la conductancia disminuye gradualmente dado que las vacancias no permanecen constantes. Aunque en las nanocintas zigzag rara vez se encuentran vacancias en el bulto sino en los bordes, existe otro tipo de desorden que si es relevante y hablaremos de este efecto en el siguiente capítulo.

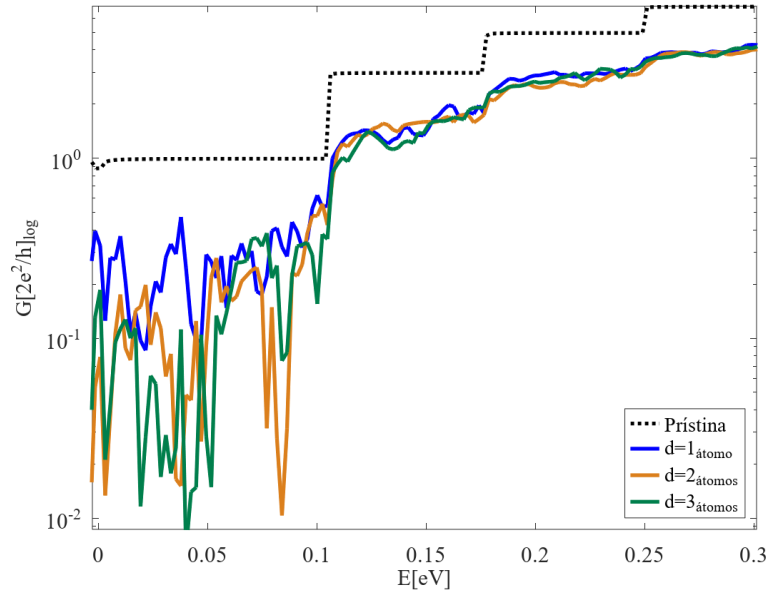


Figura 29: Promedio de la conductancia en escala logarítmica para diferentes tipos de rugosidad. Removiendo un átomo $d = 1$: $P_1 = 30\%$, removiendo dos átomos $d = 2$: $P_1 = 30\%$, $P_1 = 20\%$ y tres átomos $d = 3$: $P_1 = 30\%$, $P_1 = 20\%$, $P_3 = 10\%$.

6.2. Guías de onda en nanocintas de grafeno con desorden de borde

En esta sección realizaremos un análisis de la influencia de los defectos de borde en nanocintas de grafeno con guías de onda. Las guías de onda utilizadas son las

mismas que se presentaron en el capítulo 5. Los resultados que se muestran en esta sección son para nanocintas zigzag con longitud $L = 54.8 \text{ nm}$ y ancho $W = 25.8 \text{ nm}$. Los parámetros de los defectos de borde son: $P_1 = 30 \%$, $P_2 = 20 \%$, $P_3 = 10 \%$.

6.3. Deformación gaussiana y el efecto del desorden de borde

Siguiendo el orden de las guías de onda presentadas en el capítulo 5, en la Figura 30 se muestra el efecto del desorden de borde en una guía de onda con deformación gaussiana y en ausencia de ésta. La línea punteada negra representa la conductancia de una nanocinta prístina mientras que la línea gris continua es la conductancia de la misma nanocinta pero con defectos de borde. En la misma figura se muestra la conductancia en presencia de la guía de onda (línea naranja) y con defectos de borde (línea verde). En el capítulo anterior comparamos la conductancia modificada por este tipo de guía de onda, donde se analizó una de las regiones donde la guía de onda se mostraba muy evidente en la región de $E \sim 0.089 \text{ eV}$. Cuando el desorden de borde está presente, podemos notar que para ambos casos (prístina y con deformación) la conductancia de la primera meseta se suprime. Esta reducción es debido a la destrucción de los estados que se propagan por los bordes y esto es una consecuencia directa de haber removido átomos de los bordes porque se pierde la simetría espacial de la red. La guía de onda con desorden de borde presenta características interesantes, por ejemplo, podemos notar que existe una región de energía que exhibe canales cuasi-balísticos alrededor de $E = 0.089 \text{ eV}$, ésto, a pesar de que la primera meseta de conductancia se suprimiera. Esta región de energía es donde se manifiesta el efecto de la deformación gaussiana en la nanocinta y se ve reflejado en la modificación de

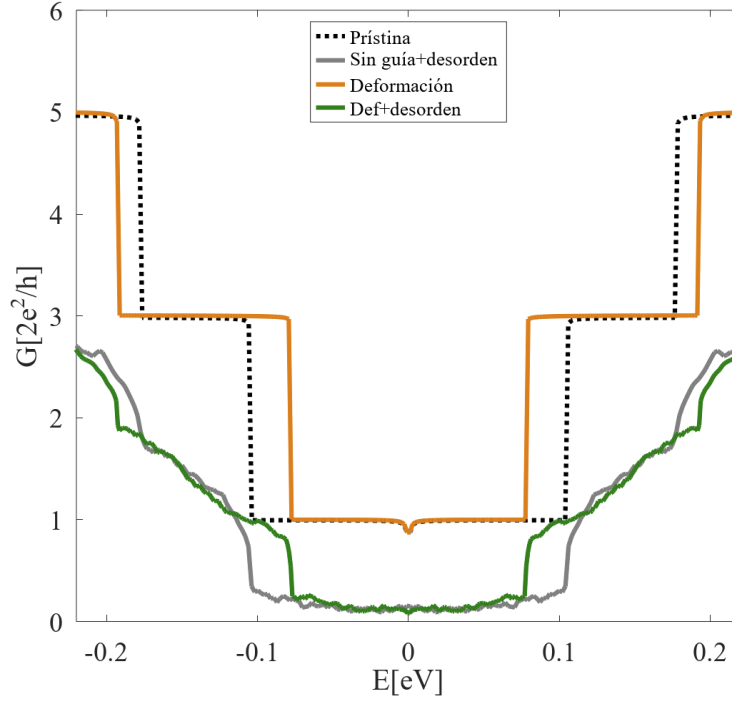


Figura 30: Conductancia $G(E)$ para una nanocinta con deformación gaussiana (línea continua naranja), con desorden de borde (línea verde), en ausencia de deformación (línea negra punteada) y sin deformación con desorden de borde (línea gris). Las curvas con desorden de borde se realizaron sobre 100 realizaciones para obtener el promedio de la conductancia. Los parámetros de los defectos de borde son: $P_1 = 30\%$, $P_2 = 20\%$, $P_3 = 10\%$.

los canales de conductancia en comparación con la prístina.

6.4. Potencial pozo cuadrado y el efecto del desorden de borde

En esta sección analizaremos el efecto del desorden de borde en una guía de onda tipo pozo cuadrado como se describe en la sección 5.2. En la Figura 31 se muestra la conductancia para una guía de onda con un potencial escalar tipo pozo

cuadrado (línea naranja) y con defectos de borde (línea verde), además se muestra la conductancia para el caso prístino y con defectos de borde para su comparación. Como era esperado, los canales de conductancia con valores $G(E) = 1$ se suprimen en presencia de desorden de borde. Como se mencionó antes, esta supresión de la conductancia se debe a que los estados de borde se destruyen debido al desorden. En adición, se observa que para la guía de onda (línea naranja) hay una modificación de dichos canales donde los estados más robustos ante estos defectos se manifiesta a una energía $E \sim 0.89 eV$. La conductancia con la guía de onda y desorden de borde muestra un pronunciado confinamiento de estados y además cuasi-balísticos en la región $0.02 < E < 0.11$. Fuera de esta región de energía podemos observar que la cuantización de la conductancia desaparece y se manifiesta lineal. Otra característica es que en la región de la robustez de estados la conductancia decae de $G(E) = 3$ (línea naranja) a $G(E) = 2$ (línea verde); esto debido a que solo se suprimen los estados de borde, sin embargo los demás estados que no son totalmente de borde permanecen.

6.5. Potencial secante hiperbólico y el efecto del desorden de borde

En esta sección analizaremos el efecto del desorden de borde en un potencial secante hiperbólico como se describe en la sección 5.3. Dada la semejanza del efecto del potencial $V(y) = U_0 \text{sech}(y)$ y del pozo cuadrado en la conductancia, solo se mencionarán las características relevantes para este caso. En la Figura 32 se muestra la conductancia en función de la energía para este sistema. Primero, los canales de conductancia con la guía de onda mantienen casi los mismos valores en comparación

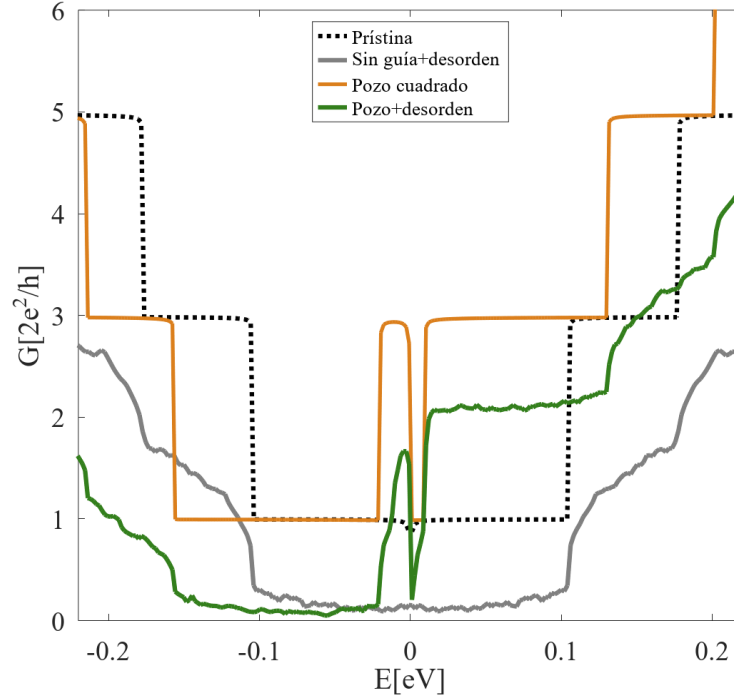


Figura 31: Conductancia para una guía de onda con un confinamiento de pozo cuadrado (línea naranja), con desorden de borde (línea verde), en ausencia de guía de onda (línea negra punteada) y en ausencia de potencial con desorden de borde (línea gris). Las curvas con desorden de borde se realizaron con 100 realizaciones para obtener el promedio. Los parámetros de los defectos de borde son: $P_1 = 30\%$, $P_2 = 20\%$, $P_3 = 10\%$.

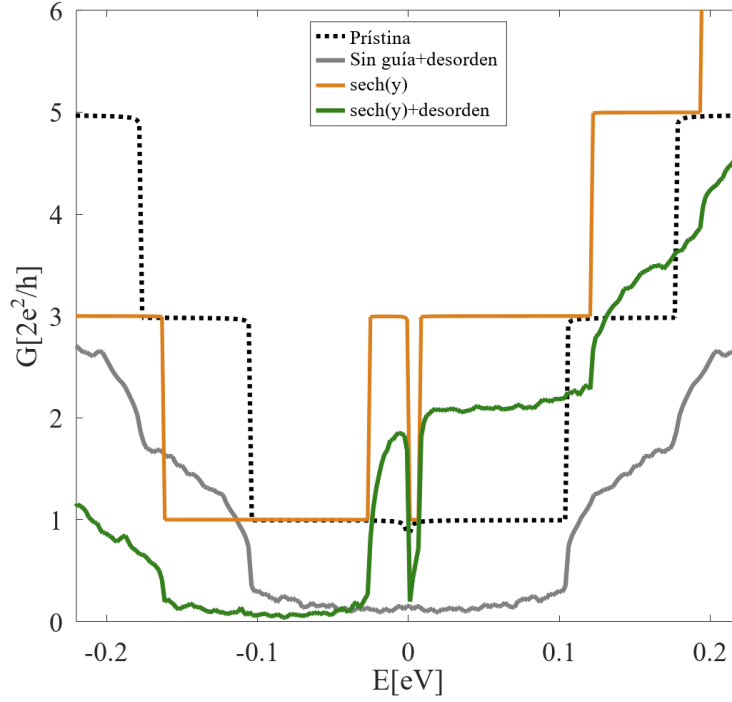


Figura 32: Conductancia para una guía de onda con un confinamiento $sech(y)$ (línea naranja), con desorden de borde (línea verde) y en ausencia de potencial con desorden (línea gris). La línea negra punteada corresponde al caso libre (sin potencial) y se incluye para indicar las energías a las cuales se modifican los canales. Los parámetros de los defectos de borde son: $P_1 = 30\%$, $P_2 = 20\%$, $P_3 = 10\%$.

con el potencial pozo cuadrado. La región donde los estados son más confinados permanecen en un rango de energía de $0.02 \text{ eV} < E < 0.11 \text{ eV}$, muy similar al caso anterior. Para el caso de desorden de borde (línea verde) se observa que los canales de conductancia $G(E) = 1$ se suprimen debido a la destrucción de los estados de borde. Para la región de confinamiento de estados ($0.02 \text{ eV} < E < 0.11 \text{ eV}$) y, específicamente para la energía $G(E) = 3$, la conductancia cae una unidad del caso sin desorden (línea naranja) al caso con desorden de borde (línea verde), similar al caso anterior mostrado con el potencial cuadrado atractivo.

6.6. Potencial bipolar y el efecto del desorden de borde

El potencial bipolar que se conforma por una combinación de potenciales del tipo $-U_0 \operatorname{sech}(y) + U_0 \operatorname{sech}(y)$, presenta propiedades únicas en la conductancia, por ejemplo la simetría de inversión en energía. En esta sección estudiaremos esta guía de onda en presencia de defectos de borde. En la Figura 33 se muestra el comportamiento de la conductancia de una nanocinta con el potencial bipolar (línea naranja) y con desorden de borde (línea verde), además se muestra el caso de una nanocinta prístina (línea negra punteada) y con desorden (línea gris). Dada la simetría en inversión de energía, solo analizaremos el comportamiento de las energías positivas. Para el caso del potencial bipolar se puede observar una conductancia de $G(E) = 1$ para la primer meseta, además de la reducción en su ancho entre el rango de energías $0 \text{ eV} < E < 0.02 \text{ eV}$, mientras que la segunda meseta incrementa su ancho como lo mencionado en la capítulo anterior con valores de conductancia $G(E) = 3$ entre los rangos de energía $0.04 \text{ eV} < E < 0.17 \text{ eV}$. Cuando el desorden de borde está presente (línea verde) se puede observar que se suprime la conductancia alrededor de los valores $0 \text{ eV} < E < 0.02 \text{ eV}$, formando un pseudogap dado que los estados de borde desaparecen. La región donde se concentran los estados confinados por la guía de onda se encuentra entre los valores $0.04 \text{ eV} < E < 0.17 \text{ eV}$ se mantienen cuasi-balísticos. Entre estos valores de energía podemos observar que los canales de conductancia caen una unidad (e^2/h) respecto a la curva sin desorden de borde. Una peculiaridad de este mecanismo son los canales de conductancia extras que se encuentran en las regiones de energía vecinas a $E \approx 0.035 \text{ eV}$ con valor de $G(E) = 5$. Estos canales se manifiestan debido a la hibridación del potencial con los estados de la nanocinta. Además, en presencia de desorden de borde, dichos canales caen un valor que excede la unidad, esto sucede por que existen estados de borde que aportan

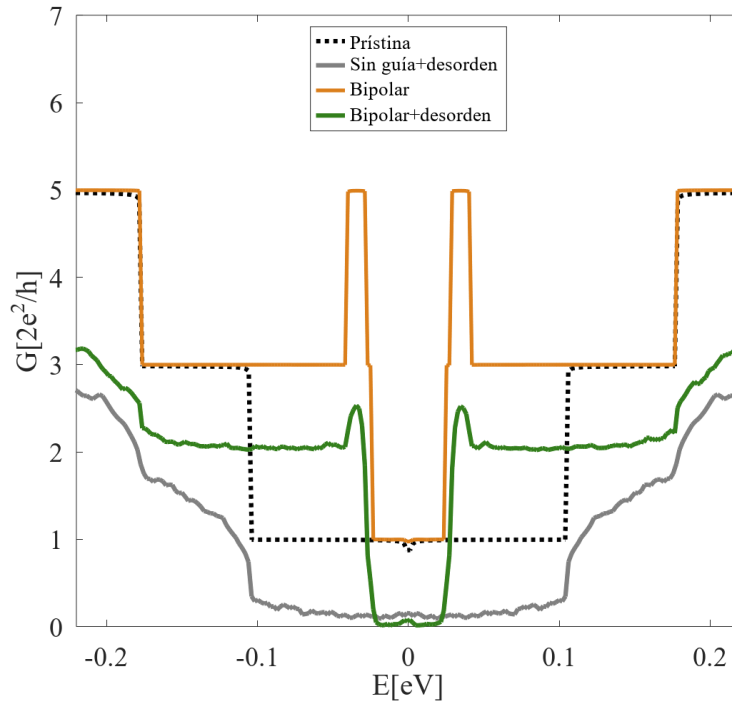


Figura 33: Conductancia en una guía de onda con un potencial bipolar (línea naranja) y con desorden de borde (línea verde). La conductancia para el caso prístino se refiere a la línea negra punteada y este caso con desorden de borde en línea gris. Los parámetros de los defectos de borde son: $P_1 = 30\%$, $P_2 = 20\%$, $P_3 = 10\%$.

valores de conductancia $G(E) = 3$, mientras que los estados de bulto aportan con dos canales $G(E) = 2$. Por lo tanto, cuando inducimos defectos de borde, se destruyen tres canales y sobreviven dos (los estados asociados al bulto). Este efecto se puede observar en la estructura de bandas mostradas en la Figura 24-(b).

7. Desorden de bulto en nanocintas de grafeno

Como se discutió en la sección anterior, las propiedades electrónicas del grafeno se ven afectados por los defectos de borde, pero también por el desorden de bulto, el cuál puede ser, por ejemplo, impurezas con carga u ondulaciones (Castro Neto *et al.*, 2009). Este tipo de desorden puede ser de dos tipos: elástico e inelástico. En el caso de un desorden elástico, la energía del electrón antes y después de una colisión se conserva. Por el contrario, un desorden inelástico se puede describir como dispersores provocados por impurezas magnéticas o fonones donde hay una transferencia de energía entre el electrón y la impureza (Rycerz *et al.*, 2007). En esta sección solo se considerarán colisiones elásticas

En la física de los sistemas mesoscópicos se describen las propiedades de los electrones a diferentes escalas de longitud. Generalmente, los electrones en metales y semiconductores experimentan un potencial de la red diferente dando lugar a diferentes regímenes de transporte. Por ejemplo, las propiedades eléctricas en muchos semiconductores dopados que presentan relación de dispersión cuadrática son bien conocidas (Yip & Chang, 1984; Giannini & Blumberger, 2022). Sin embargo, el grafeno presenta una relación de dispersión lineal por lo que su comportamiento es diferente. Por lo tanto, en este capítulo estudiaremos la influencia en la conductancia de un tipo especial de desorden utilizando el modelo de Anderson para describirlo (Mucciolo *et al.*, 2009; Lewenkopf *et al.*, 2008; Rycerz *et al.*, 2007).

7.1. Modelo de impurezas de Anderson

En el modelo de amarre fuerte a primeros vecinos, la dinámica de los electrones en grafeno se describe mediante el siguiente Hamiltoniano

$$H = \sum_i [U_i(\mathbf{r}_i) + U_{imp}(\mathbf{r}_i)] c_i^\dagger c_i - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} c_i^\dagger c_j + h.c., \quad (44)$$

donde $t_{ij} = t_0 e^{-\beta(\frac{t_{ij}}{a}-1)}$ es el tuneo modificado debido a deformaciones a primeros vecinos y U_i es la energía de sitio modificada debido al potencial electrostático $[U(y_i)]$. En el capítulo 5 describimos el primer y el último término, así que por ahora solo nos enfocaremos en describir el término faltante que refiere al desorden de bulto. En el Hamiltoniano (Ecuación 44) se muestra otro término adicional $U_{imp}(\mathbf{r}_i)$ que se refiere a un desorden de impurezas inducido aleatoriamente sobre la nanocinta. Modelamos estas impurezas mediante potenciales gaussianos con posiciones aleatorias dentro de la nanocinta y amplitudes aleatorias dentro del intervalo de energía $(-\delta U_n, \delta U_n)$ a través de la expresión,

$$U_{imp}(\mathbf{r}_i) = \sum_{n=1}^{N_{imp}} U_n \exp \left[-\frac{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_n|^2}{2\xi^2} \right], \quad (45)$$

donde $U_{imp}(\mathbf{r}_i)$ es la energía del sitio i -ésimo que proviene de la suma de las contribuciones de todas las impurezas presentes en la nanocinta, N_{imp} . Definimos la densidad de impurezas como $n_{imp} = N_{imp}/N$ donde N es el número total de átomo de carbono en la nanocinta. Además, \mathbf{r}_i y \mathbf{r}_n son las posiciones de los sitios de carbono e impurezas, respectivamente. Por último, $\xi = 2a$ mide el rango de acción del potencial asociado a la impureza. Este modelo de desorden de bulto se conoce como el modelo de Anderson y es un modelo de corto alcance que modela impurezas puntuales (ver

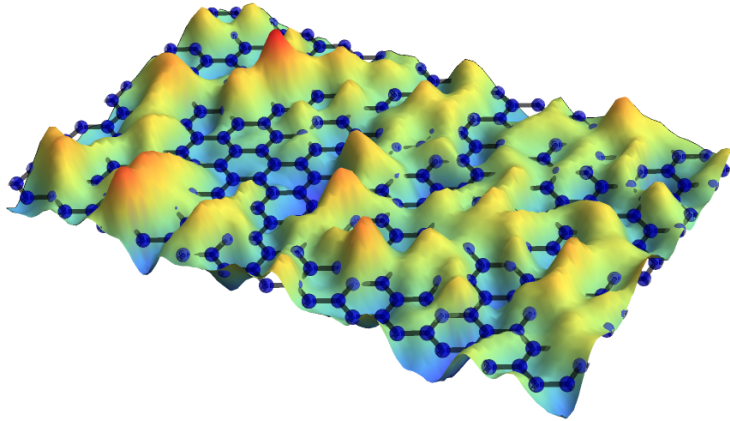


Figura 34: Diagrama esquemático de una nanocinta zigzag bajo el potencial de bulto aleatorio $U_{imp}(\mathbf{r}_i)$.

Figura 34).

En la Figura 35 se muestra la conductancia promedio de nanocintas de grafeno en presencia de desorden de bulto tipo Anderson. Para el cálculo de estas gráficas consideramos un área de la región de transporte que cuenta con 100352 sitios que corresponden a dimensiones de la nanocinta de $L = 54.8 \text{ nm}$ y $W = 25.8 \text{ nm}$. Los diferentes colores corresponden a diferentes rangos de impurezas y cada curva se obtuvo con un promedio de 40 realizaciones. Como se puede observar, aún para amplitudes reducidas de las impurezas de bulto, la conductancia se ve altamente afectada y la transición entre mesetas va decreciendo conforme aumentan los valores de energía. También podemos observar que conforme se aumenta la amplitud de las impurezas la conductancia decrece cada vez más, además si la amplitud de los dispersores es lo suficientemente grande, la conductancia comienza a tener un comportamiento lineal. Este comportamiento se mostraba similar al caso del desorden de borde, y el significado de esto es, que la supresión de la conductancia es más fuerte para valores altos

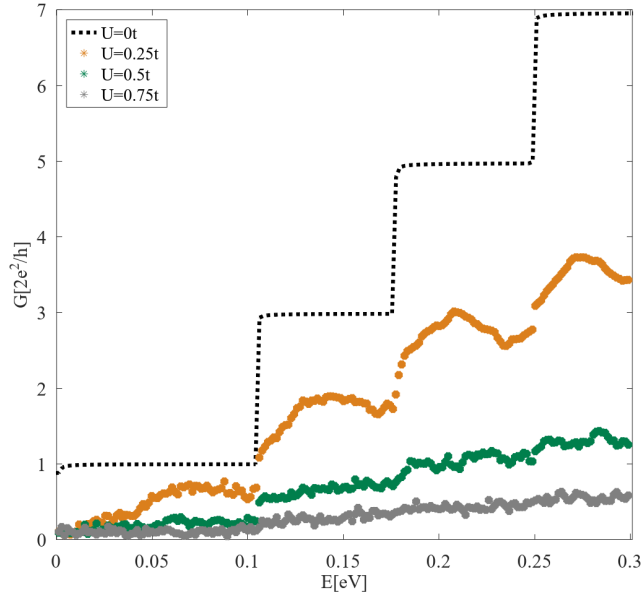


Figura 35: Conductancia promedio como función de la energía para diferentes amplitudes de desorden U para una nanocinta zigzag de ancho $W = 25.8 \text{ nm}$ y largo $L = 54.8 \text{ nm}$, con una cantidad de impurezas fija de $n_{imp} = 4\%$. Línea punteada es el caso prístino, línea naranja es el potencial de desorden de bulto de $0.25t$, línea verde es el potencial de desorden de bulto de $0.5t$ y línea gris es el potencial de desorden de bulto de $0.75t$

de potencial que para valores pequeños. Asimismo, al igual que con el desorden de borde, se manifiesta un gap en la conductancia a bajas energías $E < 0.1 \text{ eV}$.

Con el fin de determinar la distancia a la cual este tipo de desorden suprime la conductancia, en la Figura 36 se muestra el promedio de la conductancia como función de la longitud sobre 40 realizaciones para una nanocinta zigzag a una energía $E = 0.14 \text{ eV}$, el cual corresponde a la energía donde presenta tres canales de conductancia $G(E) = 3$ (ver Figura 35). Los colores representan diferentes magnitudes de desorden U . En la Figura 36-(a) se muestra la conductancia promedio lineal, mientras que la 36-(b) muestra la conductancia promedio en escala logarítmica para una longitud de $L = 100 \text{ nm}$. En esta región la conductancia decae exponencialmente

conforme se aumenta la amplitud de las impurezas, liderando la idea que conforme se aumenta el potencial de desorden, más se suprime la conductancia.

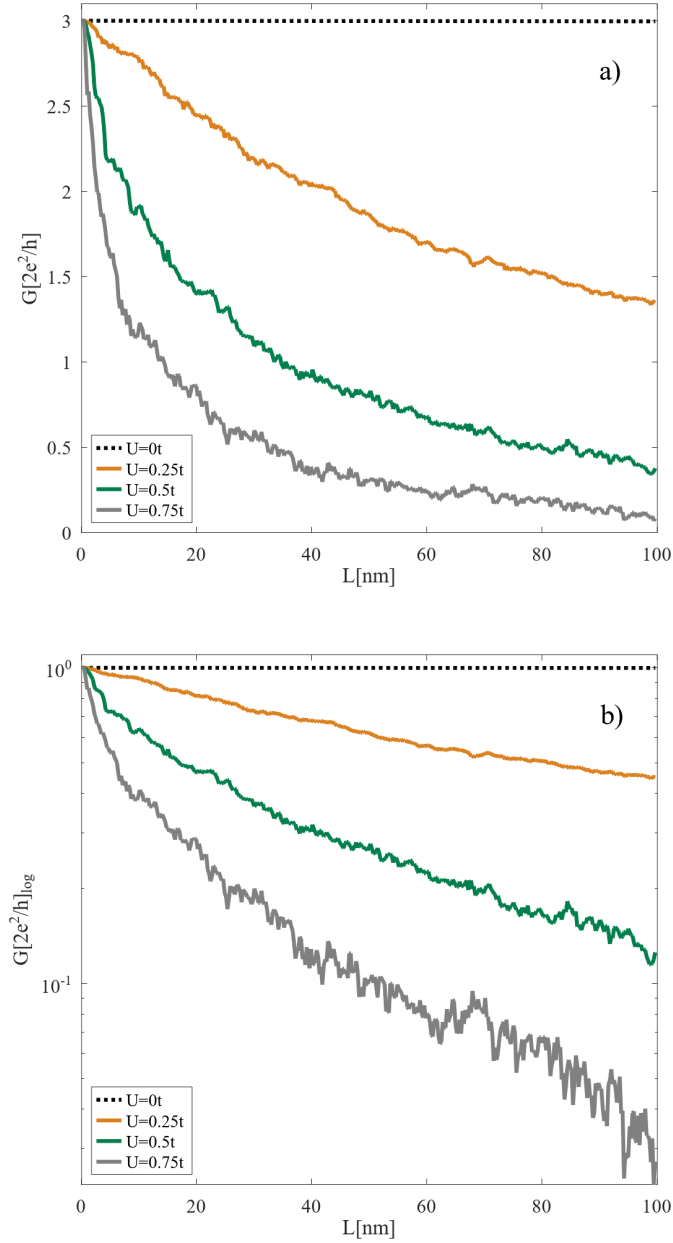


Figura 36: Conductancia promedio en función de la longitud L para una nanocinta zigzag de ancho $W = 25.8$ nm. La energía corresponde a $E = 0.14$ eV y se varió la amplitud del desorden de bulo.

7.2. Transporte electrónico en guías de onda con desorden de bulto

En esta sección trataremos el efecto del desorden de bulto en nanocintas de grafeno con guías de onda. Hasta ahora sabemos cómo afecta el desorden de borde y el desorden de bulto en nanocintas sin guías de onda y está claro que una rugosidad en los bordes moderada conduce a una supresión sustancial de la conductancia. También, de la sección anterior, sabemos que un desorden de bulto moderado afecta la cuantización de la conductancia. Ahora, estudiaremos las consecuencias de tener desorden de bulto en nanocintas con guías de onda. Experimentalmente, el desorden de bulto afecta alrededor de los valores de $U \approx 0.1t$, el cual, es una amplitud de potencial relativamente pequeño (Bischoff *et al.* , 2015). Aquí, introduciremos valores de amplitudes de desorden de bulto cercanos a los que se consultan en los reportes experimentales (Smith *et al.* , 2013; Querlioz *et al.* , 2008), por lo cual en los resultados que se presentan a continuación se utilizará un valor de potencial $U = 0.1t$ para el desorden de bulto.

Deformación Gaussiana

En la aproximación de amarre fuerte, el parámetro de tuneo a primeros vecinos se modifica en presencia de deformaciones (véase sección 5.1) y la energía de sitio se modifica mediante campos escalares. Para el caso de deformaciones elásticas, la energía de sitio también se modifica debido a cambios en el campo cristalino pero no es un cambio muy notorio.

La Figura 37 muestra la conductancia en función de la energía para una nancinta prístina (línea negra punteada), en presencia de deformación gaussiana (línea continua naranja), con deformación y desorden de borde (línea verde); y con deformación más desorden de borde y bulto (línea negra continua). El desorden de borde que se aplicó es idéntico al de la sección anterior ($P_1 = 30\%$, $P_2 = 20\%$, $P_3 = 10\%$), mientras que el desorden de bulto presenta una amplitud de potencial de los esparcidores de $\delta U = 0.1|t|$ y un porcentaje de impurezas $n_{imp} = 4\%$. En el capítulo 5 se mostró que la guía de onda asociada a una deformación gaussiana se encontraba a un valor de energía de $E = 0.089eV$, en la Figura 37 se puede observar que la conductancia a ese valor de energía los desórdenes aplicados permanecen uniformes a demás de comportarse cuasi-balísticos. Dado que las deformaciones solo afectan la energía de tuneo y el desorden de bulto afecta la energía de sitio (y la amplitud del desorden de bulto es muy pequeña), la diferencia de las variaciones en la conductancia no son tan significativas como los casos donde se utilizan campos escalares como guías de onda, lo anterior se ilustrará en las secciones posteriores.

Campos escalares

Para estos parámetros de desorden de bulto, que corresponden a valores comparables con los que se pudieran obtener en un laboratorio experimentalmente, no presentan cambios considerables en la conductancia, por lo cual, se mostrarán los resultados con desorden de borde y el efecto del desorden de bulto junto al desorden de borde.

En la Figura 38-a) se presenta la conductancia en función de la energía para una

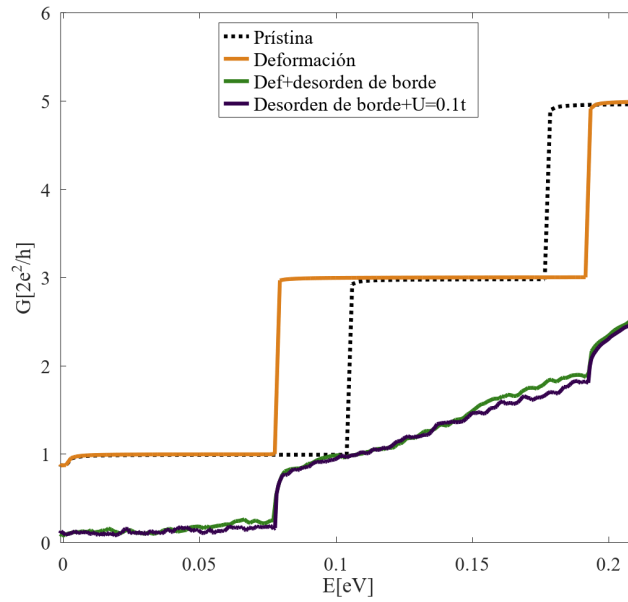
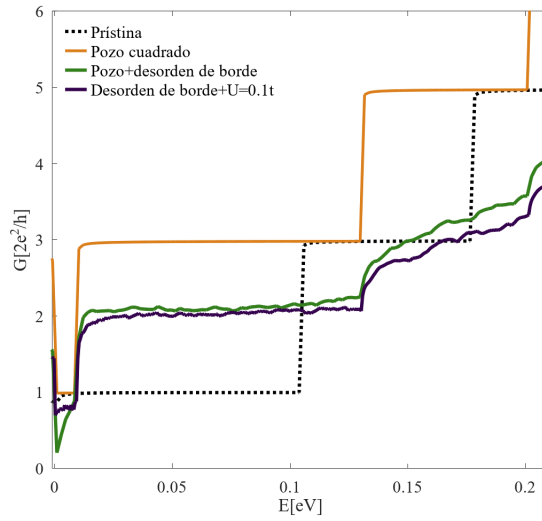
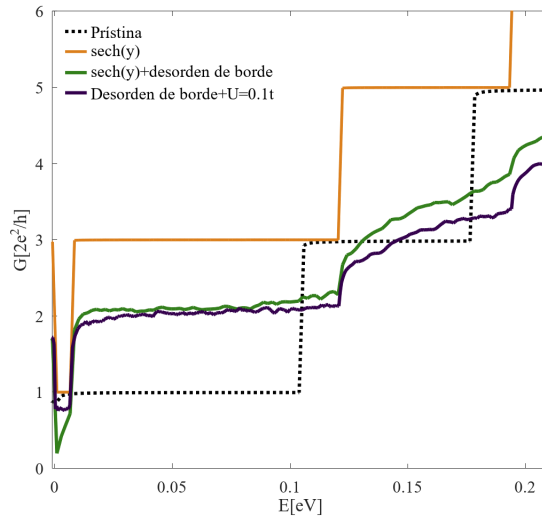


Figura 37: Conductancia promedio como función de la energía para una nanocinta zigzag de ancho $W = 25.8 \text{ nm}$ y largo $L = 54.8 \text{ nm}$. La línea verde representa el sistema con desorden de borde, mientras que la curva negra presenta desorden de borde más desorden de bulto con una cantidad de impurezas fija de $n_{imp} = 4\%$.

guía de onda tipo pozo cuadrado (figura 38-a)) y para una guía de onda $sech(y)$ (figura 38-b)). Debido a la semejanza en el comportamiento de la conductancia que ofrecen ambas guías de onda, se analizarán equitativamente. El ancho del potencial cuadrado es $W = 40a$ y una amplitud de potencial $u_0 = 0.17t$. El potencial $sech(y)$ tiene un ancho de $6.73a$ y una amplitud de $u_0 = 0.17t$. En el capítulo 6 se exhibieron los efectos del desorden de borde para estas guías de onda. Ahora, el desorden de bulto se superpone sobre el desorden de borde para obtener un desorden completo, es decir, impurezas esparcidoras y rugosidad en los bordes por vacancias de átomos de carbono. En el panel (figura 38-a)) se muestra la conductancia para el potencial escalar tipo pozo cuadrado (línea naranja), la guía con desorden de borde (color verde) y la guía con desorden de borde y de bulto. Para no ser repetitivo con las etiquetas de desorden, al conjunto del desorden de borde más el desorden de bulto le llamaremos *desorden total*. En la conductancia se muestra que el desorden de bulto afecta negativamente, descendiendo los valores de conductancia $\approx 10\%$. En el intervalo de energía $0.04 eV < E < 0.09 eV$ la diferencia entre los valores de conductancia es muy pequeña, esto sucede por que en esa región de energía es donde se concentra el modo propagante de la guía de onda que es robusto ante ambos defectos ($E = 0.084eV$ es la energía a la que se encuentra el monomodo). Similarmente, para la guía de onda $sech$, podemos observar una disminución de la conductancia cuando ambos desórdenes están presentes, descendiendo la conductancia aproximadamente un 11% . Esta guía de onda presenta un comportamiento similar al pozo cuadrado, en el intervalo de energías $0.04 < E < 0.09$ la diferencia de los valores de conductancia entre las curvas con desorden es muy escasa. Semejante al caso anterior, en esta región de energía se encuentran los estados de la guía de onda que son robustos ante ambos tipos de desorden.



(a) Para un potencial pozo cuadrado con amplitud de $U_0 = 0.17t_0$.



(b) Para un potencial $sech(y)$ con amplitud de $U_0 = 0.17t_0$

Figura 38: Conductancia promedio en función de la longitud L para una nanocinta zigzag de ancho $W = 25.8 \text{ nm}$. La energía corresponde a $E = 0.14 \text{ eV}$ y se vario la amplitud del desorden.

La guía de onda que se estudiará a continuación presenta interesantes modificaciones en los canales de la conductancia con respecto a la nanocinta prístina, además de otras propiedades que se pueden observar en la estructura de bandas como un pseudogap (Hartmann & Portnoi, 2020). En esta sección se presentan algunos cálculos numéricos con el fin de caracterizar el efecto del desorden de bulto en esta guía de onda.

En la Figura 39 se muestra la conductancia en función de la energía para una nanocinta zigzag con una guía de onda bipolar (línea naranja). La guía de onda es idéntica a la de la sección 5.4. El valle y la cresta que conforman este potencial tiene un ancho de $6.73a$ y una amplitud de $u_0 = 0.17|t|$. El promedio de la conductancia (sobre 100 realizaciones) con desorden de borde se muestra con una línea verde y el promedio de la conductancia (sobre 100 realizaciones) con desorden total con una línea negra. Anteriormente, cuando analizamos esta guía de onda, se hizo notar que la conductancia presenta simetría de inversión en energía, por eso, solo examinaremos la conductancia en las energías positivas (energía monomodo $E=0.07\text{eV}$).

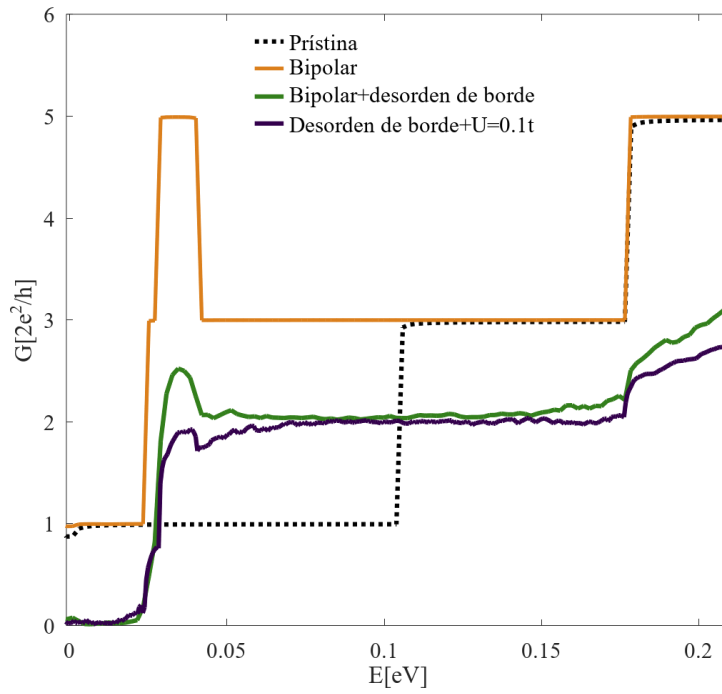


Figura 39: Conductancia promedio como función de la energía para una nanocinta zigzag de ancho $W = 25.8 \text{ nm}$ y largo $L = 54.8 \text{ nm}$. La línea verde representa el sistema con desorden de borde, mientras que la curva negra presenta desorden de borde más desorden de bulo con una cantidad de impurezas fija de $n_{imp} = 4\%$.

8. Guías de onda en sistemas de Dirac bidimensionales

Este capítulo está organizado de la siguiente manera. En primer lugar, en la Sección 8.1, presentamos el Hamiltoniano de baja energía para el grafeno con brecha y Kek-O bajo un pozo de potencial hiperbólico secante. Luego, presentamos un par de transformaciones para obtener una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden general para las componentes espinoriales de la función de onda. A continuación, en la sección 8.2, introducimos una serie de variables adimensionales para encontrar la solución exacta. Esta solución se basa en los polinomios de Heun, y sus propiedades nos permiten obtener las expresiones de los estados ligados de energía en función de la brecha (problema de cuantización). Luego, mediante una relación fija entre el ancho (λ) y la profundidad (V_0) de la guía de ondas hiperbólica secante, en la sección 8.3, estudiamos el comportamiento de los estados ligados de energía, las partes real e imaginaria de las funciones de onda y la densidad de probabilidad.

El estudio de los modos de propagación en guías de onda es esencial para lograr un transporte electrónico direccionado en materiales bidimensionales. Al mismo tiempo, explorar las brechas potenciales en estos sistemas es crucial para el desarrollo de dispositivos similares a los empleados en la electrónica convencional. A partir de los fundamentos teóricos establecidos por (Hartmann, 2017), que se centraron en la implementación de guías de onda en monocapas de grafeno sin defectos, este trabajo profundiza en el impacto de una guía de onda en sistemas de Dirac bidimensionales con brecha. Derivamos soluciones exactas que abarcan funciones de onda y estados ligados de energía para un potencial secante hiperbólico

atractivo en grafeno con brecha y sistemas en forma de "O" con distorsión Kekulé. Estas soluciones aprovechan las propiedades inherentes y las condiciones de contorno de los polinomios de Heun. Nuestros hallazgos demuestran que la manipulación del número de estados ligados de energía accesibles, es decir, los modos de propagación transversal, depende de factores como el ancho y la profundidad del potencial, así como el valor de la brecha del material bidimensional.

Los materiales bidimensionales (2D) (Xu *et al.* , 2013; Miró *et al.* , 2014; Mounet *et al.* , 2018; Ibarra-Sierra *et al.* , 2019), como el grafeno, hBN, MoS₂, fósforo negro y borofeno, ofrecen una versatilidad notable en la manipulación de sus propiedades electrónicas a través de modificaciones en su superficie. Esta ruta presenta perspectivas emocionantes para explorar nuevos estados cuánticos y avanzar en aplicaciones tecnológicas. La capacidad de inducir una brecha de banda es crucial para crear dispositivos comparables a los utilizados en la electrónica convencional. En el caso del grafeno, se han propuesto numerosos enfoques químicos y físicos para lograr una brecha de este tipo. Destacablemente, un método principal implica la formación de enlaces químicos con sustratos, lo cual introduce una diferencia de energía entre las dos subredes del grafeno, lo que resulta en la aparición de una brecha de energía (Ando, 2015). Un enfoque alternativo es la intercalación de grafeno con Litio o Calcio, lo cual induce una modulación periódica de la red del grafeno [ver Fig. 40(a)], conocido como grafeno distorsionado en forma de "O" de Kekulé (Kek-O) (Gamayun *et al.* , 2018; Mojarro *et al.* , 2020; Bao *et al.* , 2021, 2022; Eom & Koo, 2020; Qu *et al.* , 2022; Andrade *et al.* , 2022; García *et al.* , 2022; Zeng & Shen, 2022). Cálculos teóricos utilizando la aproximación de enlace fuerte han demostrado que Kek-O induce una brecha efectiva en el espectro electrónico (Gamayun *et al.* , 2018; Andrade *et al.* , 2022).

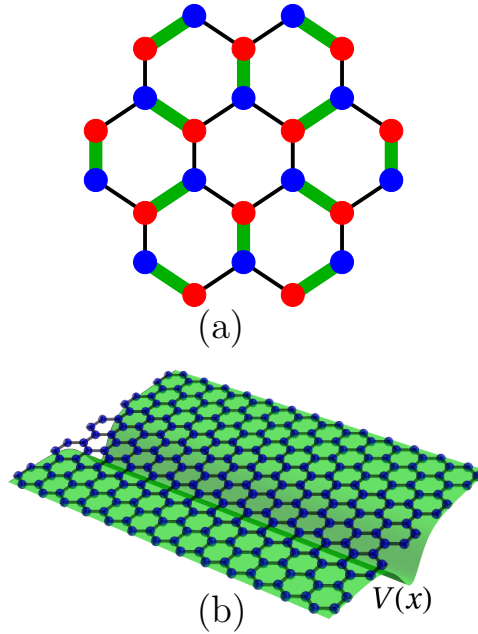


Figura 40: (a) Diagrama esquemático de una red hexagonal (tipo panal de abeja) distorsionada con Kekulé en forma de "O". (b) Monocapa de grafeno bajo un pozo de potencial hiperbólico secante definido por la Ecuación (47).

En materiales bidimensionales, el transporte electrónico puede volverse cuasi-unidimensional al definir guías de onda, lo que permite el control direccional de corrientes (Xia *et al.*, 2014) en materiales como el grafeno (Hartmann *et al.*, 2010; Hartmann & Portnoi, 2014; Hartmann, 2017; Hartmann & Portnoi, 2020; Carrillo-Bastos *et al.*, 2014; Cao *et al.*, 2017; Mosallanejad *et al.*, 2018b; Robles-Raygoza *et al.*, 2022) o el borofeno (Ng *et al.*, 2021), de manera análoga al transporte de luz en fibras ópticas (Addanki *et al.*, 2018; Dragić *et al.*, 2018). En las guías de onda electrónicas, el transporte ocurre a través de estados ligados de energía o modos de propagación que dependen de la naturaleza de los parámetros de la guía de onda, como su forma, intensidad y ancho (Hartmann *et al.*, 2010; Hartmann & Portnoi, 2014, 2020; Robles-Raygoza *et al.*, 2022).

En cuanto a la implementación de estas guías de onda, estas pueden consistir en voltajes locales de compuerta (Hartmann *et al.* , 2010; Cao *et al.* , 2017; Mosallanejad *et al.* , 2018b), deformaciones por tensión (Carrillo-Bastos *et al.* , 2014, 2016; Giambastiani *et al.* , 2022) o la aproximación de nanotubos de carbono cargados a la superficie de estos materiales bidimensionales (Hartmann & Portnoi, 2020). Por último, un estudio reciente sobre la implementación de estas guías de onda ha demostrado la posibilidad de transporte electrónico incluso en presencia de desórdenes en los bordes y en el volumen de estos sistemas bidimensionales (Mucciolo *et al.* , 2009; Robles-Raygoza *et al.* , 2022). En este trabajo, estamos interesados en estudiar la guía de ondas en sistemas tipo Dirac con brecha, utilizando potenciales escalares, centrándonos principalmente en manipular el número de modos de propagación transversal accesibles.

En particular, estudiamos el Hamiltoniano a bajas energías para grafeno con brecha, ya sea debido a la simetría de subred o a una distorsión Kek-O, bajo un potencial pozo hiperbólico-secante [ver Figuras 40(a)-(b)]. Para resolver la ecuación de Schrödinger para estos sistemas, utilizamos un conjunto de transformaciones para desacoplar las componentes de espín de la función de onda y generar una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden con coeficientes complejos. Mostramos que estas ecuaciones diferenciales de segundo orden en ambos sistemas son equivalentes; por lo tanto, podemos tratarlos de manera simultánea. Posteriormente, utilizando un conjunto de variables adimensionales (Hartmann & Portnoi, 2014), encontramos soluciones exactas para estas ecuaciones diferenciales basadas en los polinomios de Heun (Maier, 2007; Olver *et al.* , 2010; Downing, 2013; Hartmann & Portnoi, 2014).

Gracias a las propiedades de estos polinomios y sus condiciones de contorno, en-

construimos que los estados ligados de energía accesibles están determinados por la profundidad y el ancho de la guía de ondas, así como por la brecha del sistema bidimensional. Además, analizamos el comportamiento de las partes real e imaginaria de las funciones simétricas para los modos de propagación transversal accesibles debido a la guía de ondas. Por último, mostramos que la densidad de probabilidad (densidad electrónica) es invariante al valor de la brecha para un estado ligado permitido.

8.1. Modelos de grafeno con gap bajo un potencial de pozo secante hiperbólico

8.1.1. Hamiltoniano para el grafeno con gap

Consideremos el Hamiltoniano 2D del grafeno en el valle \mathbf{K} en presencia de un potencial unidimensional $V(x)$, dado por:

$$H_G = v_F (p_x \sigma_x + p_y \sigma_y) + \Delta_G \sigma_z + V(x) \sigma_0, \quad (46)$$

donde v_F es la velocidad de Fermi en la monocapa de grafeno prístino, p_x y p_y son los operadores de momento, σ_i con $i = x, y, z$ son las matrices de Pauli, y σ_0 es una matriz identidad que actúa en el grado de libertad de pseudoespín. El segundo término en la ecuación (46) describe el efecto de la brecha que proviene de la diferencia de energía entre las dos subredes del grafeno (Hartmann *et al.*, 2010; Hartmann & Portnoi, 2014). Siguiendo trabajos anteriores, estudiamos el efecto de guía de onda de un pozo potencial hiperbólico-secante $V(x)$ definido como:

$$V(x) = -V_0 \operatorname{sech}(\lambda x), \quad (47)$$

donde V_0 y λ son la amplitud y el ancho del potencial, respectivamente. El diagrama esquemático de la monocapa de grafeno bajo el potencial definido por la ecuación (47) se muestra en la Figura 40(b).

Nuestro objetivo es obtener las expresiones analíticas del espectro de energía y las funciones de onda asociadas con el Hamiltoniano (46). Para ello, utilizamos la ecuación estacionaria de Schrödinger en la forma

$$\mathcal{H}_G \Psi_G(x, y) = \mathcal{E}_G \Psi_G(x, y), \quad (48)$$

donde $\mathcal{H}_G = H_G/\hbar v_F$, $\mathcal{E}_G = E_G/\hbar v_F$, y $\Psi_G(x, y) = [\psi_A(x, y), \psi_B(x, y)]^\top$ es un espinor de dos componentes en el que A y B etiquetan las dos subredes del grafeno.

Para encontrar soluciones analíticas de la ecuación (48), primero aplicamos la siguiente transformación unitaria:

$$U_G = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_x + \sigma_z), \quad (49)$$

donde $U_G^\dagger U_G = 1$. Esta transformación cambia la ecuación (48) a:

$$\tilde{\mathcal{H}}_G \tilde{\Psi}_G(x, y) = \mathcal{E}_G \tilde{\Psi}_G(x, y), \quad (50)$$

donde $\tilde{\mathcal{H}}_G = \hat{U}_G^\dagger \mathcal{H}_G \hat{U}_G$ y el espinor transformado se define como $\tilde{\Psi}_G(x, y) = U_G^\dagger \Psi_G(x, y) = [\tilde{\psi}_1(x, y), \tilde{\psi}_2(x, y)]^\top$, donde las componentes de espín transformadas se definen como

$$\tilde{\psi}_{1,2}(x, y) = [\psi_A(x, y) \pm \psi_B(x, y)]/\sqrt{2}.$$

El siguiente paso es multiplicar ambos lados de la ecuación (50) por la matriz de Pauli σ_z , obteniendo así el siguiente problema de autovalores generalizado:

$$\tilde{\mathcal{H}}_{G2}\tilde{\Psi}_G(x, y) = \mathbb{E}_G\tilde{\Psi}_G(x, y), \quad (51)$$

donde la matriz $\mathbb{E}_G = \mathcal{E}_G\sigma_z$ y el Hamiltoniano transformado $\tilde{\mathcal{H}}_{G2} = \sigma_z\tilde{\mathcal{H}}_{G1}$ tiene la siguiente forma:

$$\tilde{\mathcal{H}}_{G2} = \tilde{p}_x\sigma_0 + i\left(\tilde{p}_y\sigma_x + \tilde{\Delta}_G\sigma_y\right) + \tilde{V}(x)\sigma_z, \quad (52)$$

con $\tilde{p}_x = -i\partial_x$, $\tilde{p}_y = -i\partial_y$, $\tilde{\Delta}_G = \Delta_G/\hbar v_F$ y $\tilde{V}(x) = V(x)/v_F\hbar$.

Según la ecuación (47), el potencial de confinamiento varía solo en la componente x ; la componente y del momento puede tomarse como un buen número cuántico. Entonces, la función de onda se puede expresar como

$$\tilde{\Psi}_G(x, y) = \exp\{ik_y y\}\tilde{\psi}_G(x), \quad (53)$$

con $\tilde{\psi}_G(x) = \left[\tilde{\psi}_1(x), \tilde{\psi}_2(x) \right]^\top$ y el momento $k_y \in \mathbb{R}$ para tener modos propagantes a lo largo de la dirección y . Posteriormente, al usar la ecuación (53) en la ecuación (51), podemos obtener la siguiente ecuación diferencial ordinaria:

$$\frac{d}{dx}\tilde{\psi}_G(x) + i\mathbb{H}_G(x)\tilde{\psi}_G(x) = 0, \quad (54)$$

donde la función matriz $\mathbb{H}_G(x)$ se define como

$$\mathbb{H}_G(x) = \left[\tilde{V}(x) - \mathcal{E}_G \right] \sigma_z + i \left[k_y \sigma_x + \tilde{\Delta}_m \sigma_y \right]. \quad (55)$$

Al seguir el tratamiento derivado de (Hartmann *et al.* , 2010), derivamos la ecuación (54) una vez más con respecto a la componente x y utilizamos la misma ecuación nuevamente. Así, encontramos la siguiente ecuación diferencial ordinaria de segundo orden:

$$\frac{d^2}{dx^2}\tilde{\psi}_G(x) + \mathbb{F}_G(x)\tilde{\psi}_G(x) = 0, \quad (56)$$

donde la nueva función matriz $\mathbb{F}_G(x)$ está dada por

$$\mathbb{F}_G(x) = \left[i \frac{d}{dx} \tilde{V}(x) \right] \sigma_z + \left[\left(\tilde{V}(x) - \mathcal{E}_G \right)^2 - \left(k_y^2 + \tilde{\Delta}_m^2 \right) \right] \sigma_0. \quad (57)$$

A partir de la ecuación (56), podemos escribir la ecuación diferencial para cada componente como:

$$\frac{d^2}{dx^2}\tilde{\psi}_\nu(x) + \left[i\nu \frac{d}{dx} \tilde{V}(x) + \left(\tilde{V}(x) - \mathcal{E}_G \right)^2 - |\tilde{k}_G|^2 \right] \tilde{\psi}_\nu(x) = 0, \quad (58)$$

donde $|\tilde{k}_G|^2 = k_y^2 + \tilde{\Delta}_G^2$ y $\nu = \pm 1$ con $\tilde{\psi}_{+1}(x) = \tilde{\psi}_1(x)$ y $\tilde{\psi}_{-1}(x) = \tilde{\psi}_2(x)$. Esta ecuación diferencial de segundo orden, en relación con los modelos anteriores (Hartmann *et al.* , 2010; Hartmann & Portnoi, 2014), incluye una modificación del número de onda k_y debido a $\tilde{\Delta}_G$, que describe la brecha en este sistema. Más adelante, podemos mostrar que este efecto determina los valores permitidos de k_y para encontrar las soluciones exactas y el número accesible de estados ligados de energía en este sistema. Por lo tanto, la solución de la ecuación (58) se muestra en la sección 8.3.

8.1.2. Hamiltoniano para el grafeno con distorsión Kekulé-O

En esta parte, estudiamos una capa monomolecular de grafeno deformado en forma de O de Kekulé (Gamayun *et al.* , 2018; Mojarro *et al.* , 2020; Bao *et al.*

, 2022; Qu *et al.*, 2022) bajo el efecto del pozo de potencial hipérbolosecante. El diagrama esquemático del texto Kek-O se muestra en la Fig. 40(a). El Hamiltoniano para este sistema (Beenakker *et al.*, 2018) está dado por

$$H_{\text{KO}} = \tau_0 \otimes [v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}] + [\Delta_{\text{KO}} \tau_x] \otimes \sigma_z + \tau_0 \otimes [V(x) \sigma_0]. \quad (59)$$

Aquí, $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ y $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ son los vectores de momento y operadores de Pauli, respectivamente. Las matrices de Pauli σ_x , σ_y , σ_z y la matriz unitaria σ_0 actúan sobre el grado de libertad de pseudoespín, mientras que las matrices τ_x , τ_y , τ_z y τ_0 se expanden en el grado de libertad de valle. El potencial $V(x)$ definido en la ecuación (59) se calcula mediante la expresión (47). El último Hamiltoniano se escribe convenientemente utilizando el producto de Kronecker (Henderson & Searle, 1981; Loan, 2000) definido por

$$\mathcal{C} \otimes \mathcal{D} = \begin{pmatrix} c_{11} \mathcal{D} & \cdots & c_{1n} \mathcal{D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{m1} \mathcal{D} & \cdots & c_{nm} \mathcal{D} \end{pmatrix}. \quad (60)$$

Aquí, \mathcal{C} es una matriz $m \times n$ y \mathcal{D} es una matriz $p \times q$. Al igual que en el caso del grafeno masivo descrito en la Sección 8.1.1, utilizamos un conjunto de transformaciones para encontrar una ecuación diferencial desacoplada general. Por lo tanto, comenzamos con la ecuación estacionaria de Schrödinger:

$$\mathcal{H}_{\text{KO}} \boldsymbol{\Psi}_{\text{KO}}(x, y) = \mathcal{E}_{\text{KO}} \boldsymbol{\Psi}_{\text{KO}}(x, y), \quad (61)$$

donde $\mathcal{H}_{\text{KO}} = H_{\text{KO}}/\hbar v_F$, $\mathcal{E}_{\text{KO}} = E_{\text{KO}}/\hbar v_F$ y después tenemos una expresión de la forma: $\boldsymbol{\Psi}_{\text{KO}}(x, y) = \exp(ik_y y) [\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \psi_4(x)]^\top$, que es un espinor de

cuatro componentes. Nuevamente, k_y es un número cuántico que describe los modos de propagación en la componente y . Las componentes de este espinor son las amplitudes en las subredes A y B para los valles K' y K (Gamayun *et al.*, 2018; Mojarro *et al.*, 2020), respectivamente. En esta parte, utilizamos la transformación unitaria $U_{\text{KO}} = \tau_0 \otimes (\sigma_x + \sigma_z) / \sqrt{2}$ y la multiplicación por la matriz $\tau_0 \otimes \sigma_z$. Estas operaciones solo afectan al espacio de pseudoespín y dejan invariante el grado de libertad de valle. Por lo tanto, la ecuación (61) se convierte en el siguiente problema generalizado de autovalores

$$\tilde{\mathcal{H}}_{\text{KO}} \tilde{\boldsymbol{\psi}}_{\text{KO}}(x) = \mathbb{E}_{\text{KO}} \tilde{\boldsymbol{\psi}}_{\text{KO}}(x), \quad (62)$$

donde la matriz $\mathbb{E}_{\text{KO}} = \mathcal{E}_{\text{KO}} (\tau_0 \otimes \sigma_z)$ y el Hamiltoniano de transformación $\tilde{\mathcal{H}}_{\text{KO}} = (\tau_0 \otimes \sigma_z) \left[U_{\text{KO}}^\dagger \mathcal{H}_{\text{KO}} U_{\text{KO}} \right]$ tiene la forma explícita:

$$\tilde{\mathcal{H}}_{\text{KO}} = \tilde{p}_x (\tau_0 \otimes \sigma_0) + i \tilde{\Delta}_{\text{KO}} (\tau_x \otimes \sigma_y) + i k_y (\tau_0 \otimes \sigma_x) + \tilde{V}(x) (\tau_0 \otimes \tau_z), \quad (63)$$

con $\tilde{\Delta}_{\text{KO}} = \Delta_{\text{KO}} / \hbar v_F$ y $\tilde{V}(x) = V(x) / \hbar v_F$. El espinor $\tilde{\boldsymbol{\psi}}_{\text{KO}}(x) = U_{\text{KO}}^\dagger \boldsymbol{\psi}_{\text{KO}}(x)$ en la ecuación (62) se define como:

$$\tilde{\boldsymbol{\psi}}_{\text{KO}}(x) = \left[\tilde{\psi}_1(x), \tilde{\psi}_2(x), \tilde{\psi}_3(x), \tilde{\psi}_4(x) \right]^\top, \quad (64)$$

donde $\tilde{\psi}_{i,i+1}(x) = [\psi_i(x) \pm \psi_{i+1}(x)] / \sqrt{2}$ y $i = 1, 3$.

Posteriormente, utilizando las ecuaciones (62) y (63), podemos obtener la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{d}{dx} \tilde{\boldsymbol{\psi}}_{\text{KO}}(x) + i \mathbb{H}_{\text{KO}}(x) \tilde{\boldsymbol{\psi}}_{\text{KO}}(x) = 0, \quad (65)$$

donde la matriz función $\mathbb{H}_{\text{KO}}(x)$ se define como:

$$\mathbb{H}_{\text{KO}}(x) = \left[\tilde{V}(x) - \mathcal{E}_{\text{G}} \right] (\tau_0 \otimes \sigma_z) + ik_y (\tau_0 \otimes \sigma_x) + i\tilde{\Delta}_{\text{KO}} (\tau_x \otimes \sigma_y). \quad (66)$$

De manera similar a la sección 8.1.1, la ecuación diferencial de segundo orden obtenida a partir de la ecuación (65) se expresa como:

$$\frac{d^2}{dx^2} \tilde{\psi}_{\text{KO}}(x) + \mathbb{F}_{\text{KO}}(x) \tilde{\psi}_{\text{KO}}(x) = 0, \quad (67)$$

donde la función matriz $\mathbb{F}_{\text{KO}}(x)$ se define como:

$$\mathbb{F}_{\text{KO}}(x) = \left[i \frac{d}{dx} \tilde{V}(x) \right] (\tau_0 \otimes \sigma_z) + \left[\left(\tilde{V}(x) - \mathcal{E}_{\text{KO}} \right)^2 - \left(k_y^2 + \tilde{\Delta}_{\text{KO}}^2 \right) \right] (\tau_0 \otimes \sigma_0). \quad (68)$$

Una vez más, podemos escribir cada componente de la ecuación diferencial de segundo orden anterior en un único componente de la siguiente manera:

$$\frac{d^2}{dx^2} \tilde{\psi}_{\nu}(x) + \left[i\nu \frac{d}{dx} \tilde{V}(x) + \left(\tilde{V}(x) - \mathcal{E}_{\text{KO}} \right)^2 - |\tilde{k}_{\text{KO}}|^2 \right] \tilde{\psi}_{\nu}(x) = 0, \quad (69)$$

donde $|\tilde{k}_{\text{KO}}|^2 = k_y^2 + \tilde{\Delta}_{\text{KO}}^2$. Aquí, el índice $\nu = \pm 1$ se refiere a los componentes del espinor $\tilde{\psi}_{+1}(x) = \tilde{\psi}_1(x) = \tilde{\psi}_3(x)$ y $\tilde{\psi}_{-1}(x) = \tilde{\psi}_2(x) = \tilde{\psi}_4(x)$. Esta ecuación diferencial (69) tiene la misma estructura que la del grafeno masivo (58). Presentamos su solución en la siguiente sección.

8.2. Soluciones exactas

Para resolver la ecuación diferencial (58) en el caso del grafeno masivo o Kek-O (69), utilizamos el método reportado por (Hartmann *et al.*, 2010). Por lo tanto, la

ecuación diferencial de segundo orden para los componentes de la función de onda $\tilde{\psi}_\nu(x)$, en ambos sistemas, puede escribirse como:

$$\frac{d^2}{dx^2}\tilde{\psi}_\nu(x) + \left[i\nu \frac{d}{dx}\tilde{V}(x) + \left(\tilde{V}(x) - \mathcal{E}_{(G, \kappa O)} \right)^2 - |\tilde{k}_{(G, \kappa O)}|^2 \right] \tilde{\psi}_\nu(x) = 0. \quad (70)$$

donde $|\tilde{k}_{(G, \kappa O)}|^2 = k_y^2 + \tilde{\Delta}_{(G, \kappa O)}^2$. La ecuación (70) puede escribirse convenientemente mediante las siguientes definiciones: $\mathcal{E}_{(G, \kappa O)} = \lambda\varepsilon$, $\tilde{V}(x) = -\omega\lambda \operatorname{sech}(\lambda x)$, $\omega = V_0/\lambda$, $k_y = \lambda\Gamma$, $\tilde{\Delta}_{(G, \kappa O)} = \lambda\Gamma_g$ y $\tilde{k}_{(G, \kappa O)} = \lambda\tilde{\Gamma}$. Aquí, ε , ω , Γ , Γ_g y $\tilde{\Gamma}$ son variables adimensionales. Bajo estas definiciones, la ecuación (70) toma la forma:

$$\frac{d^2}{dx^2}\tilde{\psi}_\nu(x) + \lambda^2 \left\{ i\nu \frac{d}{dx} [\omega \operatorname{sech}(\lambda x)] + [\omega \operatorname{sech}(\lambda x) - \varepsilon]^2 - \tilde{\Gamma}^2 \right\} \tilde{\psi}_\nu(x) = 0. \quad (71)$$

En analogía con la ecuación diferencial del problema del oscilador armónico en la mecánica cuántica no relativista (Shankar, 2012), la solución exacta de la ecuación diferencial anterior nos permitirá encontrar las expresiones analíticas de las funciones de onda y el espectro de energía para el grafeno masivo o el sistema Kek-O. Por lo tanto, las soluciones exactas (Hartmann & Portnoi, 2014) de la ecuación (71) están dadas por:

$$\tilde{\psi}_{\nu;n,m}(x) = A_\nu \left[\tilde{V}(x) \right]^{\kappa_{\nu;n}} \left[\zeta(x) - \frac{1}{2} \right]^{\mu_{\nu;n}} H_{\nu;n,m}(x), \quad (72)$$

donde $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, $m \leq n$ denotan los modos de propagación en la guía de ondas, y A_ν es una constante de normalización. Los parámetros $\kappa_{\nu;n}$ y $\mu_{\nu;n}$ en la expresión anterior se definen como:

$$\kappa_{\nu;n} = \omega - \frac{n+1}{2}, \quad (73)$$

$$\mu_{\nu;n} = -\frac{\nu}{2} - \frac{n}{2}. \quad (74)$$

La función $H_{\nu;n,m}(x)$ en la ecuación (72) son los polinomios de Heun (Maier, 2007; Olver *et al.*, 2010; Hartmann & Portnoi, 2014), cuya definición es:

$$H_{\nu;n,m}(x) = H[a, q_{\nu;n,m}; \alpha_{\nu;n}, \beta_{\nu;n}, \gamma_{\nu;n}, \delta_{\nu;n}; \zeta(x)]. \quad (75)$$

donde

$$\zeta(x) = \frac{e^{-i\pi/4} \tanh(\lambda x/2) + 1}{\sqrt{2} \tanh(\lambda x/2) - i}, \quad (76)$$

a es un parámetro de singularidad; $\alpha_{\nu;n}, \beta_{\nu;n}, \gamma_{\nu;n}, \delta_{\nu;n}$ son parámetros de exponentes y $q_{\nu;n,m}$ es un parámetro accesorio (Olver *et al.*, 2010). Para generar estos polinomios de Heun, los parámetros que definen $H_{\nu;n,m}(x)$ deben ser:

$$a = \frac{1}{2}, \quad (77)$$

$$\alpha_{\nu;n} = -n, \quad (78)$$

$$q_{\nu;n,m} = \pm 2i\omega \sqrt{|\tilde{\Gamma}n, m|^2 - \kappa\nu; n^2} - n\kappa_{\nu;n} - \frac{n}{2}(1 - \nu), \quad (79)$$

$$\beta_{\nu;n} = 2\omega - n - \nu, \quad (80)$$

$$\gamma_{\nu;n} = \delta_{\nu;n} = 2\omega - n, \quad (81)$$

donde $|\tilde{\Gamma}n, m|^2 = \Gamma^2 n, m + \Gamma_g^2$. Es importante destacar que debido a las condiciones de los polinomios de Heun y las soluciones exactas de las funciones de onda, se encuentran valores discretos para el parámetro adimensional Γ . La expresión para el

espectro de Dirac (estados ligados de energía) en este sistema se da por:

$$\varepsilon_{n,m} = \pm \sqrt{|\tilde{\Gamma}_{n,m}|^2 - \kappa_{\nu;n}^2}, \quad (82)$$

asociada a las funciones de onda (72). Los valores de $q_{\nu;n,m}$ (con $\nu = \pm 1$) en la ecuación (79) se determinan a partir del problema de autovalores:

$$\det(\mathbb{T}_{\nu;n} - q_{n,m}\mathbb{I}) = 0, \quad (83)$$

donde \mathbb{I} es una matriz unidad de tamaño $(n+1) \times (n+1)$ y $\mathbb{T}_{\nu;n}$ es una matriz tridiagonal (Hartmann *et al.*, 2010; Olver *et al.*, 2010) definida como:

$$\mathbb{T}_{\nu;n} = \begin{pmatrix} -Q_0^{\nu;n} & R_0^{\nu;n} & 0 & \cdots & 0 \\ P_1^{\nu;n} & -Q_1^{\nu;n} & R_1^{\nu;n} & \cdots & 0 \\ 0 & P_2^{\nu;n} & -Q_2^{\nu;n} & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & R_{n-1}^{\nu;n} \\ 0 & 0 & \cdots & P_n^{\nu;n} & -Q_n^{\nu;n} \end{pmatrix}, \quad (84)$$

con $R_j^{\nu;n} = (j+1)(j+\gamma_{\nu;n})/2$, $P_j^{\nu;n} = (j-1+\alpha_{\nu;n})(j-1+\beta_{\nu;n})$ y $Q_j^{\nu;n} = j[3(j-1+\gamma_{\nu;n})/2 + \delta_{\nu;n}/2 - 2\omega]$. La matriz $\mathbb{T}_{\nu;n}$ en la ecuación (84) surge de la relación de recursión de la solución de la ecuación diferencial de Heun a través del método Fuchs-Frobenius (Olver *et al.*, 2010). Por lo tanto, a partir de la ecuación (83), los subíndices en $q_{n,m}$ se refieren al m -ésimo autovalor asociado al n -ésimo estado.

Ahora, utilizando las ecuaciones (79), (82) y (83), es posible encontrar la forma explícita de las expresiones discretas para $\Gamma_{n,m}$ y posteriormente para los estados ligados de energía $\varepsilon_{n,m}$ en función de ω y la brecha adimensional Γ_g . En particular,

las expresiones discretas de $\Gamma_{n,m}$ pueden tomar valores negativos y positivos para un valor fijo de ω y Γ_g .

Las condiciones de contorno para la Ecuación (72) son $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \tilde{\psi}_{\nu;n,m}(x) = 0$ para cada estado ligado de energía. Por lo tanto, a partir de las propiedades de los polinomios de Heun (Maier, 2007; Hartmann & Portnoi, 2014), tenemos $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} H_{\nu;n,m}(x) = 1$ y el término $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} [\zeta(x) - 1/2]^{\mu_{\nu;n}} = (-1/2)^{\mu_{\nu;n}}$, donde el exponente $\mu_{\nu;n}$ puede tomar valores negativos y positivos. Por último, el término $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} [\tilde{V}(x)]^{\kappa_{\nu;n}} = 0$ solo si $\kappa_{\nu;n} > 0$. A partir de esta condición y la ecuación (73), encontramos la siguiente regla para el número posible de estados ligados de energía:

$$0 \leq n < 2\omega - 1, \quad (85)$$

y, por lo tanto, el estado más bajo $n = 0$ para $\Gamma_g = 0$ indica la relación mínima entre la profundidad y el ancho del potencial secante hiperbólico para encontrar estos estados ligados de energía, es decir, $V_0 > \lambda/2$.

De lo contrario, de las ecuaciones (54) o (65), es importante destacar que la conexión entre las funciones $\tilde{\psi}_{+1}(x)$ y $\tilde{\psi}_{-1}(x)$ en la ecuación (72) se da por:

$$\tilde{\psi}_{+1;n,m}(x) = \frac{ie^{-i\theta_{n,m}}}{|\tilde{\Gamma}_{m,n}|} \tilde{\psi}_{+1;n,m}(x) = \frac{ie^{-i\theta_{n,m}}}{|\tilde{\Gamma}_{m,n}|} \left[\varepsilon_{n,m} - \frac{1}{\lambda} \left(\tilde{V}(x) + i \frac{d}{dx} \right) \right] \tilde{\psi}_{-1;n,m}(x), \quad (86)$$

y

$$\tilde{\psi}_{-1;n,m}(x) = -\frac{ie^{i\theta_{n,m}}}{|\tilde{\Gamma}_{m,n}|} \left[\varepsilon_{n,m} - \frac{1}{\lambda} \left(\tilde{V}(x) - i \frac{d}{dx} \right) \right] \tilde{\psi}_{+1;n,m}(x), \quad (87)$$

donde $\tan \theta_{n,m} = \Gamma_g / \Gamma_{n,m}$. Por lo tanto, es posible determinar solo una de las siguientes soluciones, por ejemplo, $\tilde{\psi}_{+1;n,m}(x)$, y la solución de $\tilde{\psi}_{-1;n,m}(x)$ se determina mediante la ecuación (87).

Una vez más, en analogía con el problema del oscilador armónico cuántico no relativista, las funciones de onda tienen una paridad definida, es decir, funciones pares e impares para cada nivel cuántico. En este sentido, las funciones de onda $\tilde{\psi}_{+1,n,m}(x)$ y $\tilde{\psi}_{-1,n,m}(x)$ no son las funciones de onda simétricas asociadas al potencial de pozo hiperbólico secante (47). Para encontrar estas funciones de onda simétricas, introducimos la siguiente transformación:

$$\begin{bmatrix} \psi_{\text{I};n,m}(x)/A_{\text{I}} \\ \psi_{\text{II};n,m}(x)/A_{\text{II}} \end{bmatrix} = U_{\text{sc}} \begin{bmatrix} \tilde{\psi}_{+1,n,m}(x) \\ \tilde{\psi}_{-1,n,m}(x) \end{bmatrix}, \quad (88)$$

donde A_{I} y A_{II} son dos constantes de normalización, y

$$U_{\text{sc}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} e^{i\Theta^+_{n,m}} & e^{-i\Theta^+_{n,m}} \\ e^{i\Theta^-_{n,m}} & e^{-i\Theta^-_{n,m}} \end{bmatrix}, \quad (89)$$

es otra transformación unitaria con $\Theta^\pm_{n,m} = \theta_{n,m}/2 \pm (\pi/4) = \arctan(\Gamma_g/\Gamma_{n,m})/2 \pm (\pi/4)$. Utilizando (89), las Ecuaciones (86) y (87) pueden reescribirse como

$$\left[\tilde{V}(x) + \lambda|\tilde{\Gamma}_{n,m}| - \lambda\varepsilon_{n,m} \right] \left[\frac{1}{A_{\text{II}}} \psi_{\text{II},n,m}(x) \right] - \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{A_{\text{I}}} \psi_{\text{I},n,m}(x) \right] = 0, \quad (90)$$

$$\left[\tilde{V}(x) - \lambda|\tilde{\Gamma}_{n,m}| - \lambda\varepsilon_{n,m} \right] \left[\frac{1}{A_{\text{I}}} \psi_{\text{I},n,m}(x) \right] + \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{A_{\text{II}}} \psi_{\text{II},n,m}(x) \right] = 0. \quad (91)$$

A partir del sistema de ecuaciones diferenciales anterior, podemos observar que $\psi_{\text{I},n,m}(x)$ y $\psi_{\text{II},n,m}(x)$ conservan una paridad definida. Por ejemplo, si cambiamos $x \rightarrow -x$ en las ecuaciones (90)-(91) y se cumple que $\psi_{\text{I},n,m}(-x) = \psi_{\text{I},n,m}(x)$, $\psi_{\text{II},n,m}(-x) = -\psi_{\text{II},n,m}(x)$, entonces este sistema de ecuaciones diferenciales permanece invariante bajo la paridad del potencial $\tilde{V}(-x) = \tilde{V}(x)$.

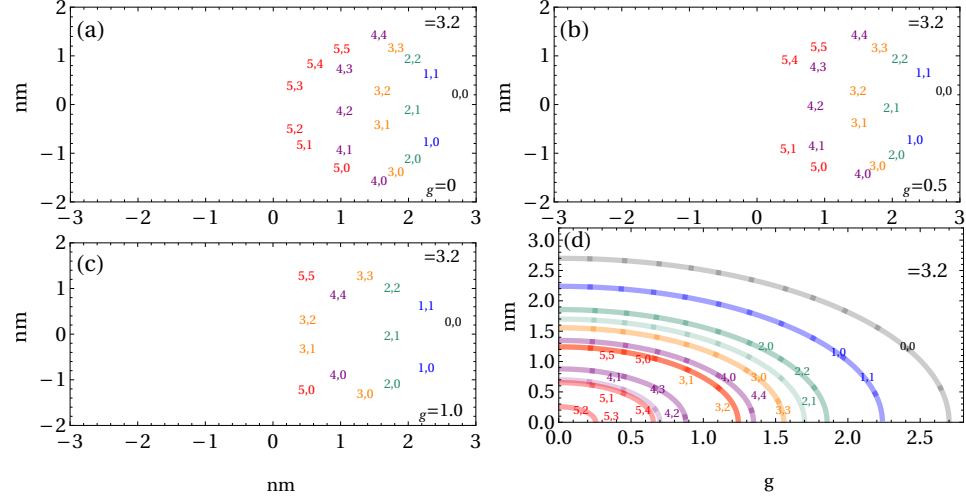


Figura 41: Espectro de energía de Dirac $\varepsilon_{n,m}$ y valores discretos $\Gamma_{n,m}$. En los paneles (a), (b) y (c), mostramos el espectro de energía de Dirac (82) (puntos cuadrados azules) en función de los valores discretos $\Gamma_{n,m}$ para $n, m = 0, 1, 2, 3, 4, 5$, $\omega = 3.2$ y usando los valores adimensionales de la brecha: $\Gamma_g = 0$, $\Gamma_g = 0.5$, $\Gamma_g = 1$, respectivamente. En el panel (a), los triángulos negros corresponden a los valores de $\varepsilon_{n,m}$ calculados en Hartmann & Portnoi (2014). En el panel (d), mostramos el comportamiento de los valores discretos $\Gamma_{n,m} > 0$ en función de la brecha adimensional Γ_g .

8.3. Espectro de energía y funciones de onda

En esta parte, discutimos los principales efectos de la guía de onda con pozo secante hiperbólico y la brecha en los sistemas 2D discutidos en la sección anterior. Para obtener el espectro de energía y las funciones de onda a partir de soluciones exactas, utilizamos la relación entre la intensidad y la anchura del potencial de pozo secante hiperbólico, que tiene un valor de $\omega = 3.2$ (Hartmann & Portnoi, 2014). Por lo tanto, utilizando la condición (85), encontramos que $n < 5.4$ y los posibles valores discretos son $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ y $m \leq n$ ($m = 0, 1, \dots, n$).

En las Figuras 41-(a), 41-(b) y 41-(c), mostramos el espectro de energía de Dirac (puntos cuadrados azules) en función de los valores discretos $\Gamma_{n,m}$ y para los valores de brecha adimensional $\Gamma_g = 0$, $\Gamma_g = 0.5$ y $\Gamma_g = 1$. Dado que los portadores de carga

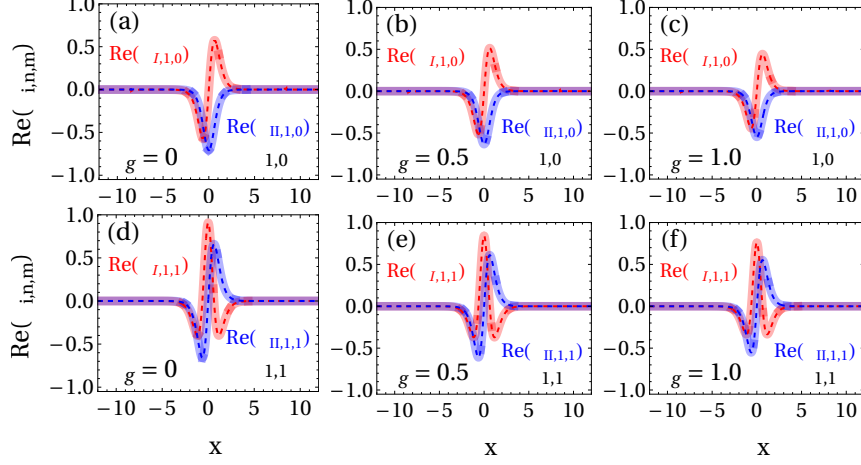


Figura 42: Parte real de las funciones de onda $\text{Re}[\psi_{i,n,m}(x)]$ con $i = I$ (rojo) e $i = II$ (azul) utilizando $\omega = 3.2$, $\Gamma_{n,m} > 0$, y para los valores adimensionales de la brecha $\Gamma_g = 0$, $\Gamma_g = 0.5$ y $\Gamma_g = 1$. En los paneles (a), (b) y (c), mostramos $\text{Re}[\psi_{i,n,m}(x)]$ para $\Gamma_{1,0}$ y $\varepsilon_{1,0}$. Los paneles (d), (e) y (f) son $\text{Re}[\psi_{i,n,m}(x)]$ para $\Gamma_{1,1}$ y $\varepsilon_{1,1}$. En todos estos paneles, las líneas sólidas claras corresponden a $\text{Re}[\psi_{i,n,m}(x)]$ dadas por (88), y las líneas discontinuas indican la solución numérica de las ecuaciones (90) y (91).

en sistemas bidimensionales como el grafeno y Kek-O son fermiones relativistas sin masa, esto marca una diferencia al estudiar el efecto del potencial secante hiperbólico y sus estados ligados de energía. Una de las principales diferencias es que estos estados ligados existen para energías simétricas positivas y negativas (Hartmann & Portnoi, 2014). Este comportamiento es diferente para sistemas no relativistas en la mecánica cuántica de portadores de carga con masa, donde los estados ligados están confinados en potenciales de pozo atractivos. Por lo tanto, en la Figura 41(a), los puntos cuadrados azules son el espectro de energía para $\Gamma_g = 0$. Este espectro es simétrico y degenerado para los valores discretos $\Gamma_{n,m} < 0$ y $\Gamma_{n,m} > 0$. En la figura 41, comparamos el mismo espectro (puntos triangulares negros) con el obtenido por Hartmann & Portnoi (2014) en el caso del grafeno con $\Gamma_g = 0$ y para las soluciones exactas. Las Figuras 41-(b) y 41-(c) muestran el espectro de energía para $\Gamma_g = 0.5$ y $\Gamma_g = 1$, respectivamente. Estas figuras muestran dos efectos principales del aumento

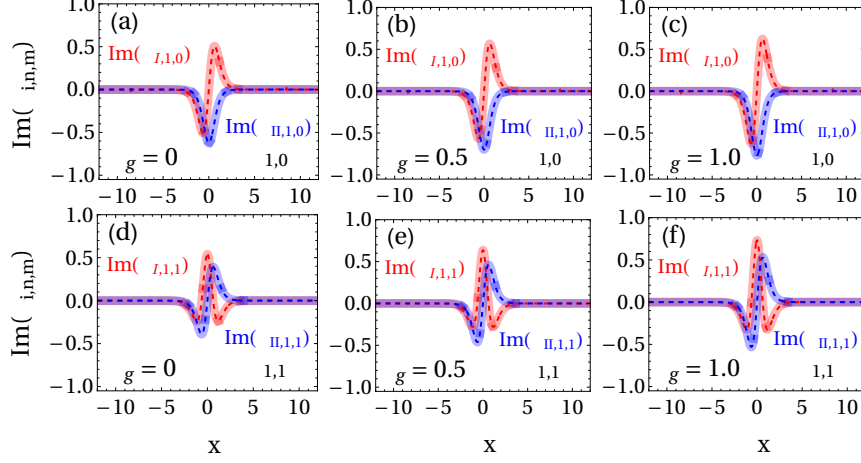


Figura 43: Parte imaginaria de las funciones de onda $\text{Im}[\psi_{i,n,m}(x)]$ con $i = \text{I}$ (rojo) e $i = \text{II}$ (azul) utilizando $\omega = 3.2$, $\Gamma_{n,m} > 0$, y para los valores adimensionales de la brecha $\Gamma_g = 0$, $\Gamma_g = 0.5$ y $\Gamma_g = 1$. En los paneles (a), (b) y (c), mostramos $\text{Im}[\psi_{i,n,m}(x)]$ para $\Gamma_{1,0}$ y $\varepsilon_{1,0}$. Los paneles (d), (e) y (f) corresponden a $\text{Im}[\psi_{i,n,m}(x)]$ para $\Gamma_{1,1}$ y $\varepsilon_{1,1}$. En todos estos paneles, las líneas sólidas claras corresponden a $\text{Im}[\psi_{i,n,m}(x)]$ dadas por (88), y las líneas discontinuas representan la solución numérica de las Ecs. (90) y (91).

en la brecha de banda. En primer lugar, existen valores prohibidos de $\Gamma_{n,m}$ y menos estados de energía accesibles, lo cual se puede interpretar como una manipulación de los modos de propagación en la guía de onda. En segundo lugar, los estados de energía presentan una pequeña traslación hacia cero de $\Gamma_{m,n}$ manteniendo su valor para un valor fijo de $\omega = 3.2$.

En cuanto al comportamiento de $\Gamma_{n,m}$, en la Figura 41(d) mostramos su conducta en función del hueco adimensional. Dado que $k_y = \lambda\Gamma = \lambda\Gamma_{n,m}$ y siguiendo la ecuación (53) para el grafeno con brecha, $\Gamma_{n,m}$ debe ser un número real. Sin embargo, estos estados con $\omega = 3.2$ tienen un valor real que posteriormente tiende a cero a medida que Γ_g aumenta. Para un valor más alto de Γ_g , $\Gamma_{n,m}$ se convierte en un número complejo. Esta transición de un valor real a un valor imaginario en $\Gamma_{n,m}$ genera estados prohibidos en el espectro de energía. Por lo tanto, esta es una forma

directa de manipular el número de estados de propagación aparte de la naturaleza de la guía de ondas.

En la figura (42) y figura (43), trazamos la parte real y la parte imaginaria de las funciones de onda $\psi_{\text{I};n,m}(x)$ (líneas azules) y $\psi_{\text{II};n,m}(x)$ (líneas rojas). En estos paneles mostramos los casos en los que: $\Gamma_{n,m} > 0$, las brechas adimensionales son $\Gamma_g = 0$, $\Gamma_g = 0.5$ y $\Gamma_g = 1$, y los estados son $\varepsilon_{1,0}$ y $\varepsilon_{1,1}$. Además, incluimos la comparación entre las soluciones exactas dadas por las ecuaciones (72) y (88) (líneas sólidas azules/rojas claras) y las soluciones numéricas correspondientes obtenidas a partir de las ecuaciones (90)-(91) (líneas punteadas azules/rojas).

Podemos observar varias características en el comportamiento de las partes real e imaginaria de las funciones de onda. Primero, cambian su paridad al cambiar el estado $\varepsilon_{n,m}$. Este comportamiento es análogo al caso no relativista para las funciones de onda en el problema del oscilador armónico cuántico. Segundo, los casos con $\Gamma_g = 0$ en las Figuras 42(a) y 42(d) para la parte real de las funciones de onda concuerdan con lo reportado en Hartmann & Portnoi (2014). Tercero, otra característica es su comportamiento en relación con la brecha adimensional. Gracias a la transformación unitaria (89), podemos observar que mantienen su paridad impar o par para los diferentes valores de brecha. En el caso de $\Gamma_g = 0.5$ y $\Gamma_g = 1$, en comparación con $\Gamma_g = 0$, la amplitud de la parte real de estas funciones de onda disminuye mientras que la parte imaginaria aumenta. Este otro efecto se debe a la ecuación (89), ya que cambiar el valor de Γ_g en los elementos de la matriz $e^{\pm i\Theta^+_{n,m}}$ modifica la parte real e imaginaria de $\psi_{\text{I};n,m}(x)$ y $\psi_{\text{II};n,m}(x)$. Sin embargo, como mostramos en los paneles de la Figura 44, la densidad de probabilidad $|\psi_{\text{I};n,m}(x)|^2 + |\psi_{\text{II};n,m}(x)|^2$ para $\varepsilon_{1,0}$ y $\varepsilon_{1,1}$ permanece invariante bajo el valor de Γ_g . Una vez más, en esta Figura 44, la

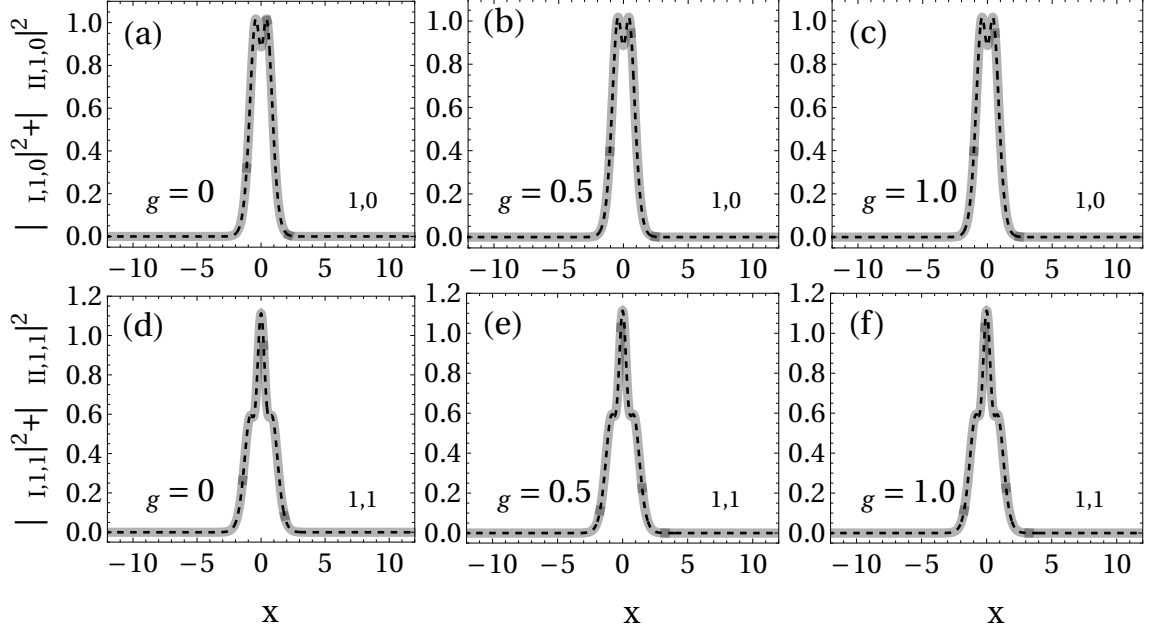


Figura 44: Densidad de probabilidad $|\psi_{I,n,m}(x)|^2 + |\psi_{II,n,m}(x)|^2$ para $\omega = 3.2$, $\Gamma_{n,m} > 0$, y utilizando los valores adimensionales de la brecha: $\Gamma_g = 0$, $\Gamma_g = 0.5$ y $\Gamma_g = 1.0$. En (a), (b) y (c), mostramos la densidad de probabilidad para $\Gamma_{1,0}$ y $\varepsilon_{1,0}$. Las figuras (d), (e) y (f) corresponden a la densidad de probabilidad para $\Gamma_{1,1}$ y $\varepsilon_{1,1}$. En todos estos paneles, las líneas sólidas claras corresponden a la densidad de probabilidad obtenida a partir de las funciones de onda (88). Las líneas discontinuas representan la solución numérica utilizando las ecuaciones (90) y (91). A partir de estos resultados, es claro que la densidad de probabilidad es invariante respecto al valor de Γ_g .

línea gris sólida corresponde a la densidad de probabilidad utilizando las soluciones exactas de las ecuaciones (72) y (88) y las líneas punteadas se obtienen a partir de la solución numérica de las ecuaciones (90) y (91).

En este capítulo presentamos el estudio de estados energéticos ligados y funciones de onda en un sistema bidimensional con brecha en presencia de un potencial de pozo hiperbólico secante. Siguiendo el caso del grafeno sin brecha (Hartmann & Portnoi, 2014), aplicamos ciertas transformaciones en la ecuación de Schrödinger estacionaria para encontrar una ecuación diferencial de segundo orden desacoplada para cada elemento espinorial de la función de onda. Luego, encontramos las soluciones exac-

tas en estos sistemas 2D utilizando un conjunto de variables adimensionales. Estas soluciones exactas son proporcionales a los polinomios de Heun y sus propiedades nos permiten encontrar los estados energéticos ligados en función de la brecha del sistema 2D. Mostramos que el número accesible de modos de propagación depende del ancho y profundidad del potencial, así como del valor de la brecha del sistema. En particular, estudiamos este comportamiento en un sistema de grafeno con brecha y en grafeno deformado en forma de O con distorsión Kekulé. Después, encontramos las soluciones exactas en estos sistemas 2D utilizando un conjunto de variables adimensionales. Estas soluciones exactas son proporcionales a los polinomios de Heun y sus propiedades nos permiten encontrar los estados energéticos ligados en función de la brecha del sistema 2D. Mostramos que el número accesible de modos de propagación depende del ancho y la profundidad del potencial, así como del valor de la brecha del sistema. En particular, estudiamos este comportamiento en un sistema de grafeno con brecha y en grafeno deformado en forma de "O" con distorsión Kekulé.

9. Conclusiones

En resumen, hemos estudiado el transporte electrónico en ZGNRs bajo el efecto de guías de onda y la presencia de desorden en los bordes y en el bulto. Revisamos los casos del pliegue por tensión, pozo cuadrado, pozo secante hiperbólico y potenciales bipolares. Observamos que para $\tilde{E} > 0$, el número de canales balísticos aumenta debido a los modos de propagación en estas guías de onda. Estos canales adicionales son estados de borde modificados por la guía de onda. En presencia de desorden en los bordes y en el volumen, la conductancia disminuye; sin embargo, existen modos de propagación asociados a la guía de onda, que exhiben un transporte cuasi balístico. En particular, los potenciales de pozo cuadrado, pozo secante hiperbólico y bipolares tienen modos protegidos más robustos, incluso al aumentar la longitud de la nanocinta. Además, presentamos el estudio de estados ligados de energía y funciones de onda en un sistema bidimensional con brecha en presencia del potencial de pozo hiperbólico secante. Siguiendo el caso del grafeno sin brecha reportado por Hartmann & Portnoi (2014), aplicamos ciertas transformaciones en la ecuación de Schrödinger estacionaria para encontrar una ecuación diferencial de segundo orden desacoplada para cada componente espinorial de la función de onda. Luego, encontramos las soluciones exactas en estos sistemas 2D utilizando un conjunto de variables adimensionales. Estas soluciones exactas son proporcionales a los polinomios de Heun, y sus propiedades nos permiten encontrar los estados ligados de energía en función de la brecha del sistema 2D. Mostramos que el número accesible de modos de propagación depende de la amplitud y profundidad del potencial, así como del valor de la brecha del sistema. En particular, estudiamos este comportamiento en un sistema de grafeno con brecha y en el caso de grafeno con distorsión en

forma de O de Kekulé. Esperamos que nuestro trabajo pueda contribuir a mejorar los dispositivos electrónicos basados en grafeno. (Williams *et al.* , 2011).

Apéndices

A. Cálculo de los valores discretos de Γ

En esta parte, mostramos la lista de valores discretos $\Gamma_{n,m}$ y los autovalores $\varepsilon_{n,m}$ en función de los parámetros adimensionales ω y Γ_g para $n = 0, 1, 2$ y $m \leq n$ ($m = 0, 1, \dots, n$)

$$\begin{aligned}\Gamma_{0,0} &= \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 - 4\Gamma_g^2 - 4\omega + 4\omega^2} \\ \Gamma_{1,0} &= \pm \frac{1}{2\sqrt{\omega}} \sqrt{4\omega^3 - 8\omega^2 - 4\Gamma_g^2\omega + 5\omega - 1}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Gamma_{1,1} &= \pm \frac{1}{2\sqrt{\omega}} \sqrt{4\omega^3 - 8\omega^2 - 4\Gamma_g^2\omega + 5\omega - 1} \\
\Gamma_{2,0} &= \pm \frac{1}{2\omega} \sqrt{4\omega^4 - 12\omega^3 - 4\Gamma_g^2\omega^2 + 13\omega^2 - 6\omega + 1} \\
\Gamma_{2,1} &= \pm \frac{1}{2} \sqrt{4\omega^2 - 12\omega - 4\Gamma_g^2 + 9} \\
\Gamma_{2,2} &= \pm \frac{1}{2\omega} \sqrt{4\omega^4 - 12\omega^3 - 4\Gamma_g^2\omega^2 + 13\omega^2 - 6\omega + 1} \\
\varepsilon_{0,0} &= 0 \\
\varepsilon_{1,0} &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\omega - 1}{\omega}} \\
\varepsilon_{1,1} &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\omega - 1}{\omega}} \\
\varepsilon_{2,0} &= -\frac{1}{2\omega} \sqrt{4\omega^2 - 6\omega + 1} \\
\varepsilon_{2,1} &= 0 \\
\varepsilon_{2,2} &= \frac{1}{2\omega} \sqrt{4\omega^2 - 6\omega + 1}
\end{aligned}$$

10. Publicaciones

- Robles-Raygoza, E. J., Ibarra-Sierra, V. G., Sandoval-Santana, J. C., Carrillo-Bastos, R. (2022). Ballistic guided electrons against disorder in graphene nanoribbons. *Journal of Applied Physics*, 132(16).
- Ibarra-Sierra, V. G. and Robles-Raygoza, E. J. and Sandoval-Santana, J. C. and Carrillo-Bastos, R. (2023). Waveguiding in massive two-dimensional Dirac systems. *Journal of Applied Physics*, 134(12).

Referencias

- Addanki, S., Amiri, I., and Yupapin, P. (2018). Review of optical fibers-introduction and applications in fiber lasers. *Results in Physics*, 10:743–750.
- Ando, T. (2015). Theory of valley hall conductivity in graphene with gap. *Journal of the Physical Society of Japan*, 84(11):114705.
- Andrade, E., Carrillo-Bastos, R., Asmar, M. M., and Naumis, G. G. (2022). Kekulé-induced valley birefringence and skew scattering in graphene. *Phys. Rev. B*, 106:195413.
- Areshkin, D. A., Gunlycke, D., and White, C. T. (2007). Ballistic transport in graphene nanostrips in the presence of disorder: importance of edge effects. *Nano Letters*, 7(1):204–210.
- Bao, C., Zhang, H., Wu, X., Zhou, S., Li, Q., Yu, P., Li, J., Duan, W., and Zhou, S. (2022). Coexistence of extended flat band and kekulé order in li-intercalated graphene. *Phys. Rev. B*, 105:L161106.
- Bao, C., Zhang, H., Zhang, T., Wu, X., Luo, L., Zhou, S., Li, Q., Hou, Y., Yao, W., Liu, L., Yu, P., Li, J., Duan, W., Yao, H., Wang, Y., and Zhou, S. (2021). Experimental evidence of chiral symmetry breaking in kekulé-ordered graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 126:206804.
- Basu, D., Gilbert, M. J., Register, L. F., Banerjee, S. K., and MacDonald, A. H. (2008). Effect of edge roughness on electronic transport in graphene nanoribbon channel metal-oxide-semiconductor field-effect transistors. *Applied Physics Letters*, 92(4):042114.

- Beenakker, C. W. J., Gnezdilov, N. V., Dresselhaus, E., Ostroukh, V. P., Herasymenko, Y., Adagideli, i. d. I., and Tworzydło, J. (2018). Valley switch in a graphene superlattice due to pseudo-andreev reflection. *Phys. Rev. B*, 97:241403.
- Bischoff, D., Varlet, A., Simonet, P., Eich, M., Overweg, H., Ihn, T., and Ensslin, K. (2015). Localized charge carriers in graphene nanodevices. *Applied Physics Reviews*, 2(3):031301.
- Cao, S.-M., Zhou, J.-J., Wei, X., and Cheng, S.-G. (2017). Investigation of valley-resolved transmission through gate defined graphene carrier guiders. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 29(14):145301.
- Carrillo-Bastos, R., Faria, D., Latgé, A., Mireles, F., and Sandler, N. (2014). Gaussian deformations in graphene ribbons: Flowers and confinement. *Phys. Rev. B*, 90:041411.
- Carrillo-Bastos, R., León, C., Faria, D., Latgé, A., Andrei, E. Y., and Sandler, N. (2016). Strained fold-assisted transport in graphene systems. *Physical Review B*, 94(12):125422.
- Castro Neto, A. H., Guinea, F., Peres, N. M. R., Novoselov, K. S., and Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 81:109–162.
- Celis, A., Nair, M. N., Taleb-Ibrahimi, A., Conrad, E. H., Berger, C., de Heer, W. A., and Tejeda, A. (2016). Graphene nanoribbons: fabrication, properties and devices. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 49(14):143001.
- Cheng, A., Taniguchi, T., Watanabe, K., Kim, P., and Pillet, J.-D. (2019). Guiding dirac fermions in graphene with a carbon nanotube. *Phys. Rev. Lett.*, 123:216804.

- Cresti, A. and Roche, S. (2009). Range and correlation effects in edge disordered graphene nanoribbons. *New Journal of Physics*, 11(9):095004.
- Datta, S. (1995). Electronic transport in mesoscopic systems, cambridge studies in semiconductor physics and microelectronic engineering.
- Datta, S. (2005). Quantum transport: atom to transistor, cambridge university press.
- Downing, C. A. (2013). On a solution of the schrödinger equation with a hyperbolic double-well potential. *Journal of Mathematical Physics*, 54(7):072101.
- Dragic, P. D., Cavillon, M., and Ballato, J. (2018). Materials for optical fiber lasers: A review. *Applied Physics Reviews*, 5(4):041301.
- Dutta, S. and Pati, S. K. (2010). Novel properties of graphene nanoribbons: a review. *J. Mater. Chem.*, 20:8207–8223.
- Eom, D. and Koo, J.-Y. (2020). Direct measurement of strain-driven kekulé distortion in graphene and its electronic properties. *Nanoscale*, 12:19604–19608.
- Evaldsson, M., Zozoulenko, I. V., Xu, H., and Heinzl, T. (2008). Edge-disorder-induced anderson localization and conduction gap in graphene nanoribbons. *Phys. Rev. B*, 78:161407.
- Fisher, D. S. and Lee, P. A. (1981). Relation between conductivity and transmission matrix. *Physical Review B*, 23(12):6851.
- Friebele, E. J. and Griscom, D. L. (1985). Color centers in glass optical fiber waveguides. *MRS Online Proceedings Library*, 61(1):319–331.

- Fujita, M., Wakabayashi, K., Nakada, K., and Kusakabe, K. (1996). Peculiar localized state at zigzag graphite edge. *Journal of the Physical Society of Japan*, 65(7):1920–1923.
- Gamayun, O. V., Ostroukh, V. P., Gnezdilov, N. V., Adagideli, Í., and Beenakker, C. W. J. (2018). Valley-momentum locking in a graphene superlattice with y-shaped kekulé bond texture. *New Journal of Physics*, 20(2):023016.
- García, S. G. y., Stegmann, T., and Betancur-Ocampo, Y. (2022). Generalized hamiltonian for kekulé graphene and the emergence of valley-cooperative klein tunneling. *Phys. Rev. B*, 105:125139.
- Geim, A. K. and Novoselov, K. S. (2007). The rise of graphene. *Nature materials*, 6(3):183–191.
- Giambastiani, D., Tommasi, C., Bianco, F., Fabbri, F., Coletti, C., Tredicucci, A., Pitanti, A., and Roddaro, S. (2022). Strain-engineered wrinkles on graphene using polymeric actuators. *Phys. Rev. Appl.*, 18:024069.
- Giannini, S. and Blumberger, J. (2022). Charge transport in organic semiconductors: the perspective from nonadiabatic molecular dynamics. *Accounts of Chemical Research*, 55(6):819–830.
- Gunlycke, D., Areshkin, D. A., and White, C. T. (2007). Semiconducting graphene nanostrips with edge disorder. *Applied Physics Letters*, 90(14):142104.
- Gunlycke, D. and White, C. T. (2011). Graphene valley filter using a line defect. *Physical Review Letters*, 106(13):136806.
- Han, M. Y., Özyilmaz, B., Zhang, Y., and Kim, P. (2007). Energy band-gap engineering of graphene nanoribbons. *Physical review letters*, 98(20):206805.

- Hartmann, R. R. and Portnoi, M. E. (2017). Two-dimensional dirac particles in a pöschl-teller waveguide. *Scientific Reports*, 7(1):11599.
- Hartmann, R. R. and Portnoi, M. E. (2014). Quasi-exact solution to the dirac equation for the hyperbolic-secant potential. *Phys. Rev. A*, 89:012101.
- Hartmann, R. R. and Portnoi, M. E. (2020). Bipolar electron waveguides in graphene. *Phys. Rev. B*, 102:155421.
- Hartmann, R. R., Robinson, N. J., and Portnoi, M. E. (2010). Smooth electron waveguides in graphene. *Phys. Rev. B*, 81:245431.
- Henderson, H. V. and Searle, S. R. (1981). The vec-permutation matrix, the vec operator and kronecker products: a review. *Linear and Multilinear Algebra*, 9(4):271–288.
- Ibarra-Sierra, V. G., Sandoval-Santana, J. C., Kunold, A., and Naumis, G. G. (2019). Dynamical band gap tuning in anisotropic tilted dirac semimetals by intense elliptically polarized normal illumination and its application to 8-*pmmn* borophene. *Phys. Rev. B*, 100:125302.
- Kim, M., Choi, J.-H., Lee, S.-H., Watanabe, K., Taniguchi, T., Jhi, S.-H., and Lee, H.-J. (2016). Valley-symmetry-preserved transport in ballistic graphene with gate-defined carrier guiding. *Nature Physics*, 12(11):1022.
- Kobayashi, Y., Fukui, K.-i., Enoki, T., and Kusakabe, K. (2006). Edge state on hydrogen-terminated graphite edges investigated by scanning tunneling microscopy. *Physical Review B*, 73(12):125415.
- Lee, P. A. and Fisher, D. S. (1981). Anderson localization in two dimensions. *Physical Review Letters*, 47(12):882.

- Lewenkopf, C. H. and Mucciolo, E. R. (2013). The recursive green's function method for graphene. *Journal of Computational Electronics*, 12(2):203–231.
- Lewenkopf, C. H., Mucciolo, E. R., and Castro Neto, A. H. (2008). Numerical studies of conductivity and fano factor in disordered graphene. *Phys. Rev. B*, 77:081410.
- Lherbier, A., Biel, B., Niquet, Y.-M., and Roche, S. (2008). Transport length scales in disordered graphene-based materials: strong localization regimes and dimensionality effects. *Physical review letters*, 100(3):036803.
- Li, T. C. and Lu, S.-P. (2008). Quantum conductance of graphene nanoribbons with edge defects. *Phys. Rev. B*, 77:085408.
- Li, X., Wang, X., Zhang, L., Lee, S., and Dai, H. (2008). Chemically derived, ultrasmooth graphene nanoribbon semiconductors. *science*, 319(5867):1229–1232.
- Loan, C. F. (2000). The ubiquitous kronecker product. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 123(1):85–100. Numerical Analysis 2000. Vol. III: Linear Algebra.
- Lu, Y. and Guo, J. (2010). Band gap of strained graphene nanoribbons. *Nano Research*, 3(3):189–199.
- Maier, R. (2007). The 192 solutions of the heun equation. *Mathematics of Computation*, 76(258):811–843.
- Marmolejo-Tejada, J. M. and Velasco-Medina, J. (2016). Review on graphene nanoribbon devices for logic applications. *Microelectronics Journal*, 48:18–38.
- Martin, I. and Blanter, Y. M. (2009). Transport in disordered graphene nanoribbons. *Physical Review B*, 79(23):235132.

- Miró, P., Audiffred, M., and Heine, T. (2014). An atlas of two-dimensional materials. *Chemical Society Reviews*, 43(18):6537–6554.
- Mojarro, M. A., Ibarra-Sierra, V. G., Sandoval-Santana, J. C., Carrillo-Bastos, R., and Naumis, G. G. (2020). Dynamical floquet spectrum of kekulé-distorted graphene under normal incidence of electromagnetic radiation. *Phys. Rev. B*, 102:165301.
- Mosallanejad, V., Wang, K., Qiao, Z., and Guo, G. (2018a). Perfectly conducting graphene electronic waveguide with curved channels. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 30(32):325301.
- Mosallanejad, V., Wang, K., Qiao, Z., and Guo, G. (2018b). Perfectly conducting graphene electronic waveguide with curved channels. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 30(32):325301.
- Mounet, N., Gibertini, M., Schwaller, P., Campi, D., Merkys, A., Marrazzo, A., Sohler, T., Castelli, I. E., Cepellotti, A., Pizzi, G., and Marzari, N. (2018). Two-dimensional materials from high-throughput computational exfoliation of experimentally known compounds. *Nature Nanotechnology*, 13(3):246–252.
- Mucciolo, E. R., Castro Neto, A. H., and Lewenkopf, C. H. (2009). Conductance quantization and transport gaps in disordered graphene nanoribbons. *Phys. Rev. B*, 79:075407.
- Mucciolo, E. R. and Lewenkopf, C. H. (2010). Disorder and electronic transport in graphene. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 22(27):273201.
- Munoz-Rojas, F., Jacob, D., Fernández-Rossier, J., and Palacios, J. (2006). Coherent transport in graphene nanoconstrictions. *Physical Review B*, 74(19):195417.

- Nakada, K., Fujita, M., Dresselhaus, G., and Dresselhaus, M. S. (1996). Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence. *Phys. Rev. B*, 54:17954–17961.
- Naumis, G. G., Barraza-Lopez, S., Oliva-Leyva, M., and Terrones, H. (2017). Electronic and optical properties of strained graphene and other strained 2d materials: a review. *Reports on Progress in Physics*, 80(9):096501.
- Ng, R. A., Wild, A., Portnoi, M. E., and Hartmann, R. R. (2021). Mapping borophene onto graphene: Quasi-exact solutions for guiding potentials in tilted dirac cones.
- Olver, F. W., Lozier, D. W., Boisvert, R. F., and Clark, C. W. (2010). *NIST handbook of mathematical functions hardback and CD-ROM*. Cambridge university press.
- Pedersen, J. G., Gunst, T., Markussen, T., and Pedersen, T. G. (2012). Graphene antidot lattice waveguides. *Physical Review B*, 86(24):245410.
- Planck, M. (1900). The theory of heat radiation. *Entropie*, 144(190):164.
- Qu, A. C., Nigge, P., Link, S., Levy, G., Michiardi, M., Spandar, P. L., Matthé, T., Schneider, M., Zhdanovich, S., Starke, U., Gutiérrez, C., and Damascelli, A. (2022). Ubiquitous defect-induced density wave instability in monolayer graphene. *Science Advances*, 8(23):eabm5180.
- Querlioz, D., Apertet, Y., Valentin, A., Huet, K., Bournel, A., Galdin-Retailleau, S., and Dollfus, P. (2008). Suppression of the orientation effects on bandgap in graphene nanoribbons in the presence of edge disorder. *Applied Physics Letters*, 92(4):042108.

- Ribeiro, R., Pereira, V. M., Peres, N., Briddon, P., and Neto, A. C. (2009). Strained graphene: tight-binding and density functional calculations. *New Journal of Physics*, 11(11):115002.
- Rickhaus, P., Liu, M.-H., Makk, P., Maurand, R., Hess, S., Zihlmann, S., Weiss, M., Richter, K., and Schönenberger, C. (2015). Guiding of electrons in a few-mode ballistic graphene channel. *Nano Letters*, 15(9):5819–5825.
- Robles-Raygoza, E. J., Ibarra-Sierra, V. G., Sandoval-Santana, J. C., and Carrillo-Bastos, R. (2022). Ballistic guided electrons against disorder in graphene nanoribbons. *Journal of Applied Physics*, 132(16):164305.
- Rycerz, A., Tworzydło, J., and Beenakker, C. W. J. (2007). Anomalously large conductance fluctuations in weakly disordered graphene. *Europhysics Letters (EPL)*, 79(5):57003.
- Schubert, E. F. (2018). *Light-emitting diodes (2018)*. E. Fred Schubert.
- Shah, N. A., Mosallanejad, V., Chiu, K.-L., and Guo, G.-p. (2019). Design of graphene waveguides: Effect of edge orientation and waveguide configuration. *Phys. Rev. B*, 100:125412.
- Shankar, R. (2012). *Principles of quantum mechanics*. Springer Science & Business Media.
- Smith, C. W., Katoch, J., and Ishigami, M. (2013). Impact of charge impurities on transport properties of graphene nanoribbons. *Applied Physics Letters*, 102(13):133502.

- Torres, L. E. F., Roche, S., and Charlier, J.-C. (2014). *Introduction to graphene-based nanomaterials: from electronic structure to quantum transport*. Cambridge University Press.
- Valagiannopoulos, C. (2021). Wideband enhancement of quantum scattering from material impurities. *Phys. Rev. Applied*, 15:064007.
- Van Wees, B., Van Houten, H., Beenakker, C., Williamson, J. G., Kouwenhoven, L., Van der Marel, D., and Foxon, C. (1988). Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. *Physical Review Letters*, 60(9):848.
- Wakabayashi, K., Sasaki, K.-i., Nakanishi, T., and Enoki, T. (2010). Electronic states of graphene nanoribbons and analytical solutions. *Science and technology of advanced materials*.
- Williams, J., Low, T., Lundstrom, M., and Marcus, C. (2011). Gate-controlled guiding of electrons in graphene. *Nature Nanotechnology*, 6(4):222.
- Wurm, J., Wimmer, M., and Richter, K. (2012). Symmetries and the conductance of graphene nanoribbons with long-range disorder. *Phys. Rev. B*, 85:245418.
- Xia, F., Wang, H., Xiao, D., Dubey, M., and Ramasubramaniam, A. (2014). Two-dimensional material nanophotonics. *Nature Photonics*, 8(12):899–907.
- Xu, M., Liang, T., Shi, M., and Chen, H. (2013). Graphene-like two-dimensional materials. *Chemical Reviews*, 113(5):3766–3798.
- Yagmurcukardes, M., Peeters, F. M., Senger, R. T., and Sahin, H. (2016). Nanoribbons: From fundamentals to state-of-the-art applications. *Applied Physics Reviews*, 3(4):041302.

- Yip, S.-k. and Chang, Y.-C. (1984). Theory of phonon dispersion relations in semiconductor superlattices. *Physical Review B*, 30(12):7037.
- Zeng, W. and Shen, R. (2022). Light-modulated josephson effect in kekulé patterned graphene. *Phys. Rev. B*, 105:094510.
- Zubair, M., Bahrami, M., and Vasilopoulos, P. (2019). Transport in armchair graphene nanoribbons and in ordinary waveguides. *Journal of Applied Physics*, 126(16):164304.