

Tesis defendida por
Ramón Carrillo Bastos

y aprobada por el siguiente Comité

Dr. Francisco Mireles Higuera
Codirector de Comité

Dra. Nancy Sandler
Codirector de Comité

Dr. Ernesto Cota Araiza
Miembro del Comité

Dr. Eugenio Rafael Méndez Méndez
Miembro del Comité

Dr. Jorge Villavicencio Aguilar
Miembro del Comité

Dra. Laura Viana Castrillón
Miembro del Comité

Dr. Manuel Herrera Zaldívar
Miembro del Comité

Dr. Leonel Cota Araiza
Coordinador del posgrado
en Física de Materiales

Dr. Jesús Favela Vara
Director de la
Dirección de Estudios de Posgrado

Julio de 2014

**CENTRO DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y DE
EDUCACIÓN SUPERIOR DE ENSENADA, BAJA
CALIFORNIA**



**PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIAS
EN FÍSICA DE MATERIALES**

**Transporte electrónico dentro y fuera de equilibrio en nanocintas
de grafeno**

Tesis

para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para obtener el grado de

Doctor en Ciencias

Presenta:

Ramón Carrillo Bastos

Ensenada, Baja California, México,

2014

Resumen de la tesis de **Ramón Carrillo Bastos**, presentada como requisito parcial para la obtención del grado de Doctor en Ciencias en Física de Materiales.

Transporte electrónico dentro y fuera de equilibrio en nanocintas de grafeno

Resumen aprobado por:

Dr. Francisco Mireles Higuera

Codirector de Tesis

Dra. Nancy Sandler

Codirector de Tesis

Estudiamos el transporte electrónico a través de nanocintas de grafeno *armchair* y *zigzag* conectadas a reservorios. Nos enfocamos en dos situaciones físicas, ambas realizables experimentalmente. La primera, el transporte en equilibrio, en particular los efectos de una deformación gaussiana centrosimétrica en la conductancia y la densidad de estados (DOS) con y sin campo magnético. La segunda, el transporte fuera de equilibrio, específicamente la corriente que se genera entre los contactos cuando se disponen, en las dos zonas de conexión, campos eléctricos dependientes del tiempo armónicamente y con una fase relativa, produciendo la llamada corriente de bombeo. En ambos casos los electrones en las nanocintas se describen en la aproximación de amarre fuerte.

Para el transporte en equilibrio, independiente del tiempo, utilizamos el método de la función de Green recursiva. Las deformaciones se introducen como cambios locales en la energía de tuneo (pseudo-campo magnético) y en la energía de sitio (potencial de deformación). Los resultados muestran que la deformación disminuye la conductancia, excepto para el rango de energía asociado con el escalón cero (cintas metálicas). Se presentan además caídas en la conductancia que generan mínimos locales. Clasificamos estos mínimos en dos categorías, aquellos que se asocian a la presencia de estados confinados, pues se acompañan con la formación de picos en la DOS, y aquellos que se asocian a la mezcla de modos, pues se presentan antes del surgimiento de un escalón en la conductancia. La deformación hace que la DOS local se distribuya en el espacio formando estructuras con una incipiente simetría de 60° , formando seis sectores. Cada uno de estos sectores presenta una asimetría de subred que se alterna entre sectores contiguos.

La corriente de bombeo se analiza con el formalismo de Keldysh. Usando la periodicidad en el tiempo del potencial, se desacoplan las ecuaciones fijando una frecuencia de corte y utilizando un método de renormalización. Se presenta el desarrollo de un procedimiento recursivo para la evaluación de las expresiones resultantes y el cálculo de la corriente de bombeo. Con el método presentado se reproducen resultados publicados en la literatura y se exponen resultados preliminares. A frecuencias bajas, la corriente de bombeo muestra el comportamiento lineal con la frecuencia asociado al régimen adiabático. Al aumentar el valor de la frecuencia la corriente oscila cambiando de signo.

Palabras Clave: **Transporte electrónico, nanocintas de grafeno, deformaciones, bombeo cuántico**

Abstract of the thesis presented by **Ramón Carrillo Bastos**, in partial fulfillment of the requirements of the degree of Ph.D. in Materials Physics.

Equilibrium and non-equilibrium electronic transport in graphene nanoribbons

Abstract approved by:

Dr. Francisco Mireles Higuera

Codirector de Tesis

Dra. Nancy Sandler

Codirector de Tesis

We study the electronic transport in armchair and zigzag graphene nanoribbons when connected to reservoirs. We focus on two physical situations, both experimentally realizable. The first, considers the effects of a center -symmetrical Gaussian deformation on the equilibrium conductance and density of states of nanoribbons. These studies are extended to include the presence of an external magnetic field. The second situation involves out-of-equilibrium transport. In this case the current (pump current) is generated between equilibrium reservoirs when two time dependent electric fields with a relative phase are applied at the contacts. In both cases the tight-binding approximation is used.

To study the time independent equilibrium transport, we use the recursive Green function method. The lattice deformation is introduced as a local change in the hopping parameter (pseudo-magnetic field) and the on-site energies (deformation potential). Results show that the presence of the deformation decreases the conductance in all energy ranges except the one associated with the zeroth-plateau. In addition, the conductance exhibits local minima. We classify these minima in two categories: those associated with the presence of confined states, accompanied by peaks in the density of states, and those associated with mode mixing. The deformation distorts the local density of states forming structures with incipient 60° symmetry, creating 6 sectors. Each one of these sectors presents an alternating sublattice occupancy, emphasizing the emergence of sublattice symmetry breaking.

The pump current is analyzed with the Keldysh formalism. Since the potential is periodic in time, we decouple the equations for the Green functions by introducing a cut-off frequency and using a renormalization scheme. We present a recursive procedure to evaluate the resulting expressions. With this method we reproduce published results and present preliminary ones for the systems of interest. At low frequencies, the pump current shows the linear behavior with the frequency associated with adiabatic regime. At greater frequencies the current oscillates changing sign.

Keywords: **Electronic transport, graphene nanoribbons, deformations, quantum pumping**

*A mi muy querido
amigo y colega, Jesús
A. Castañeda Montes
(QEPD)*

Agradecimientos

Al Dr. Francisco Mireles Higuera por la dirección de esta tesis, las horas de discusión, los consejos y las oportunidades que me brindó durante el desarrollo de la misma.

A la Dra. Nancy Sandler por el entusiasmo y apoyo al co-dirigir mi trabajo de tesis. Los resultados que se presentan dependen en gran manera de su ojo crítico y su rigurosidad.

A los miembros de mi comité, Dr. Ernesto Cota, Dr. Eugenio Méndez, Dr. Jorge Villavicencio, Dra. Laura Viana y Dr. Manuel Herrera, por su ayuda y guía durante la realización de esta tesis. Su cooperación fue fundamental en la finalización de la misma.

A mis colaboradoras, las doctoras Daiara Faria, Tejinder Kaur y Andrea Latgé. Los resultados de esta tesis son mayormente un resultado del trabajo en equipo y colaboración. Especialmente a Daiara, quien además me brindó su amistad.

Al Dr. Sergio Ulloa, por recibirme en su grupo de investigación en la Universidad de Ohio, así como por sus valiosas y oportunas asesorías.

A mi muy admirado y querido amigo, el próximo Doctor, Mahmoud Asmar por sus múltiples y útiles consejos, asesorías y apoyo.

A mis compañeros y amigos, Priscila Iglesias y Rubén Villarreal. En particular a Priscila, a la que más allá de las discusiones de Física, que hubo varias muy provechosas. Le agradezco hacer más agradables las tardes en el cubo.

A los miembros del *dice seminar* del departamento de Física y Astronomía de la Universidad de Ohio. A los doctores David A. Ruiz-Tijerina, Diego Mastroguiseppe, Greg Petersen, Mariama Rebello y a los próximos doctores Halyne Borges y Vivaldo Lopes, en compañía de los cuales aprendí muchas cosas útiles para mi trabajo de tesis. Particularmente, me gustaría reiterar mi agradecimiento a Diego, a quien además de las discusiones sobre Física le debo el apoyo, la compañía y la ayuda constante. Además me gustaría agradecer a Greg Petersen por su ayuda con los códigos de decimación, esto facilitó mucho mi trabajo de tesis.

A mi asesor de Maestría, el Dr. Fernando Rojas, sus enseñanzas de entonces me sirvieron también para finalizar mi doctorado.

A mis padres, Alicia Bastos Becerra y Ramón Carrillo Navidad, por todo.

Contenido

Resumen en español	ii
Resumen en inglés	iii
Dedicatoria	iv
Agradecimientos	v
1. Introducción	1
2. Funciones de Green para el transporte electrónico	4
2.1 Conceptos preliminares	5
2.2 Teoría de la función de Green en equilibrio	7
2.3 Formalismo de Keldysh: función de Green fuera de equilibrio	10
2.4 Formalismo de Landauer y la relación con la función de Green	16
2.4.1 La conductancia	17
2.4.2 El formalismo de Landauer	19
2.4.3 Aproximación de respuesta lineal	27
2.4.4 Büttiker-Landauer: múltiples contactos	28
2.4.5 Función de Transmisión y Matriz \mathbf{S}	30
2.4.6 Combinación de matrices \mathbf{S}	31
2.4.7 Relación con las funciones de Green	31
2.5 Determinación de la función de Green	33
2.5.1 Aproximación de amarre fuerte	33
2.5.2 Método de decimación	37
2.5.3 Cálculo de la función de Green en equilibrio: Método recursivo	38
2.5.4 Observables físicas en términos de la función de Green en equilibrio	42
3. Método de renormalización para el transporte dependiente del tiempo	43
3.0.5 Detalles del modelo	43
3.0.6 Procedimiento de renormalización para un armónico	46
3.0.7 Corriente de bombeo	47
3.0.8 Método de evaluación	47
4. El grafeno	55
4.1 Modelo en aproximación de amarre fuerte para grafeno	56
4.2 Estructura de bandas	59
4.3 Hamiltoniano efectivo	61
4.4 Nanocintas de grafeno	62
5. Transporte en nanocintas de grafeno con deformaciones gaussianas	65
5.1 Efectos de deformaciones en el transporte electrónico en grafeno	65
5.2 Modelo	68

5.3	Resultados y discusiones	70
5.3.1	Transporte con deformaciones	70
5.3.2	Potencial de Deformación	78
5.3.3	El efecto del campo magnético	84
5.3.4	Transporte con campo magnético y deformaciones	86
6.	Bombeo cuántico en nanocintas de grafeno	90
6.1	Bombas cuánticas	90
6.2	Bombeo en cadena unidimensional	95
6.2.1	Modelo	95
6.2.2	Resultados y discusiones	96
6.3	Bombeo en nanocintas de grafeno	99
6.3.1	Modelo	99
6.3.2	Resultados y discusiones	99
7.	Conclusiones	103
7.1	Trabajo a futuro	104
	Lista de referencias	105

Lista de figuras

1	Contorno C_t	12
2	Contorno C	13
3	Contornos para C_1 y C_2	14
4	Deformación del contorno c	15
5	a) Conductor en medio de dos contactos a diferentes potenciales, los contactos se asumen no reflejantes. b) Relaciones de dispersión para los modos dentro del conductor. (basada en la figura original de Datta (1995))	20
6	a) Conductor conectado a dos grandes contactos a través de dos cables. b) Distribución de energía de los electrones incidentes en ambos cables a temperatura cero. c) Distribuciones de energía para temperatura diferente de cero.	23
7	Esquema de un contacto cuántico puntual. En sombra se muestra la región del gas bidimensional de electrones, sobre de él los dos contactos que generan el voltaje de compuerta. (Extraído de Van Houten y Beenakker, 1996).	25
8	Conductancia de un contacto cuántico puntual como función del voltaje de compuerta. La conductancia presenta escalones asociados a los estados transversales en el dispositivo. (tomada de van Wees <i>et al.</i> (1988))	26
9	Diagrama de un conductor con geometría Hall con múltiples contactos.	28
10	División del sistema físico en regiones.	35
11	Diagrama para la obtención de las autoenergías.	37
12	Esquema del dispositivo, una estructura T con una región central más ancha que los contactos.	39
13	Esquema del método de la función de Green recursiva descrito en el texto. En el primer paso (a), se agregan los términos de autoenergía, después se conectan las otras columnas (b), hasta llegar a la última (c) y obtener la función de Green de todo el sistema (d).	41
14	Esquema del dispositivo bidimensional. La región central está conectada a dos reservorios. En la región de contactos, se disponen potenciales cosenoidales en el tiempo aplicados que generan el bombeo de carga de un contacto a otro.	43
15	Esquema para la representación de sitios por coordenadas	48
16	(a) Esquema de la estructura del grafeno con ambas redes A y B . (b) zonas de Brillouin para ambas celdas, unitaria y cuadrada.	57
17	Izquierda: Estructura de bandas de grafeno para $M = V_0 = 0$. Derecha: Acercamiento de la estructura de bandas alrededor del punto K . Tomada de Wimmer (2005).	60
18	Estructura de bandas del grafeno medida experimentalmente utilizando la espectroscopía de fotoemisión con resolución angular.(extraída de Bostwick <i>et al.</i> (2007))	61

- 19 Características generales de las estructuras de bandas para nanocintas con terminaciones *zigzag* a) y *armchair* b). Los paneles superiores muestran nanocintas de grafeno y sus correspondientes celdas unitarias. Los paneles inferiores muestran la orientación de la zona de Brillouin para el caso de una nanocinta unidimensional, así como la estructura de bandas correspondiente (extraída de Wimmer (2005)) 63
- 20 (Color online) Representación esquemática de una nanocinta de grafeno con una deformación gaussiana de amplitud A y anchura media b en su centro. La región central (verde), con longitud L y ancho W , está conectada a reservorios (azul), modelados como contactos infinitos de grafeno. 69
- 21 Conductancia (G) y densidad total de estados (DOS) de: AGNR ($W = 25.4\text{nm}$, $L = 28.0\text{nm}$) [a) y c)], y ZGNR ($W = 25.8\text{ nm}$, $L = 27.4\text{ nm}$) [b) y d)] para diferentes valores de la amplitud, A (0.85, 1.14 y 1.42 nm), y ancho fijo $b = 4.3\text{ nm}$, correspondientes a valores de estiramiento de 4, 7 y 11% respectivamente. Las líneas punteadas corresponden al sistema en ausencia de deformación. Los resultados para la DOS se graficaron con una traslación en el eje vertical para facilitar la visualización. Las líneas verticales indican las energías a las que se gráfica la densidad local de estados en Fig. 23. 71
- 22 Conductancia (G) y densidad total de estados (DOS) de: AGNR ($W = 25.4\text{ nm}$, $L = 28.0\text{ nm}$) [a) y c)], y ZGNR ($W = 25.8\text{ nm}$, $L = 27.4\text{ nm}$) [b) y d)] para amplitud, A , fija y diferentes anchos, b (2.85, 1.14 y 1.42 nm), con valores de estiramiento de 25, 11 y 7% respectivamente. La línea discontinua negra corresponde al sistema sin deformación. Las curva para la densidad de estados se han desplazado sobre el eje vertical para posibilitar su visualización 73
- 23 Densidad local de estados para: AGNR [paneles a), b)] y ZGNR [paneles c) y d)] con amplitudes de la deformación de $A = 1.42\text{ nm}$ y $b = 4.3\text{ nm}$ y energías marcadas con líneas verticales y correspondientes colores en la Fig. 21 : a) (azul) $E = 0.1\text{ eV}$, b) (verde) $E = 0.15\text{ eV}$, c) (rojo) $E = 0.15\text{ eV}$ y d) (naranja) $E = 0.21\text{ eV}$. Las escalas en u.a. están optimizadas para exhibir claramente regiones con mayor densidad de estados. 74
- 24 a) Densidad local de estados (LDOS) en u.a. para ZGNR de ancho $W = 25.8\text{ nm}$ y largo $L = 27.3\text{ nm}$, en presencia de una deformación gaussiana de amplitud $A = 0.7\text{ nm}$ y $b = 1.4\text{ nm}$, a energía $E = 0.042\text{ eV}$. Las posiciones atómicas para la red sin deformación están marcadas con triángulos: La subred A se indica con triángulos hacia arriba y la subred B con triángulos hacia abajo. El centro de la deformación gaussiana está marcado con un círculo negro. Los paneles b) y c) muestran la densidad local de estados para la subred A y B, respectivamente. 75
- 25 a) Densidad local de estados (LDOS) en u.a. para AGNR de ancho ($W = 25.4\text{ nm}$, $L = 28.0\text{ nm}$), en presencia de una deformación gaussiana de amplitud $A = 0.7\text{ nm}$ y $b = 1.4\text{ nm}$, a energía $E = 0.042\text{ eV}$. Las posiciones atómicas para la red sin deformación están marcadas con triángulos: La subred A se indica con triángulos hacia arriba y la subred B con triángulos hacia abajo. El centro de la deformación gaussiana está marcado con un círculo negro. Los paneles b) y c) muestran la densidad local de estados para la subred A y B, respectivamente. 77

26	Potencial escalar de deformación producido por una deformación gaussiana con amplitud $A = 1.4$ nm, dispersión $b = 4.3$ nm y constante de acoplamiento $g = -3.0$ eV.	79
27	Efecto del potencial de deformación en la conductancia para AGNR ($W = 30.0$ nm, $L = 30.7$ nm) [a) y b)], y ZGNR ($W = 25.8$ nm, $L = 27.4$ nm) [c) y d)] nm para valores de $g = -1.0$ (rojo), -2.0 (verde), -3.0 (púrpura) eV. La deformación gaussiana tiene amplitud $A = 1.4$ nm y dispersión $b = 4.3$ nm. Las curvas negras corresponden a cantidades en ausencia de deformación. Las curvas azul son para $g = 0.0$ eV (y corresponden a las curvas azul de las figuras Fig. 21 y Fig.22).	81
28	LDOS en presencia del potencial de deformación para energías correspondientes al mínimo en la conductancia (véase el acercamiento en la Fig.27). AGNR: a) $E = 0.119$ eV y $g = 0$, b) $E = 0.098$ eV y $g = -3$ eV. ZGNR: c) $E = 0.159$ eV y $g = 0$, d) $E = 0.124$ eV y $g = -3$ eV. Los otros parámetros del sistemas son iguales a aquellos de la Fig.27.	82
29	Efecto del potencial de deformación en la LDOS para AGNR a energía fija $E = 0.1$ eV con a) $g = 0$ y b) $g = -3.0$ eV. Los paneles c) y d) muestran la LDOS por subred con $g = -3.0$ eV. Los otros parámetros del sistema corresponden a los de la Fig.27.	83
30	Conductancia y densidad de estados para una nanocinta con bordes zigzag (ZGNR) de longitud, $L = 27.4$ nm, y ancho, $W = 25.8$ nm en presencia de campo magnético. El panel a) muestra la conductancia, G , como función de la energía de Fermi, E , para diferentes valores del campo magnético. En panel b) se exhibe la densidad total de estados junto con la conductancia para $B = 10$ T. Los paneles c), d), e) y f) muestran la densidad local de estados a energía, $E = 0.14$ eV, y campo magnético $B = 0$ T, $B = 10$ T, $B = 20$ T y $B = 30$ T, respectivamente.	85
31	Conductancia, G , como función de la energía de Fermi, E , para una nanocinta con bordes <i>zigzag</i> (ZGNR) de longitud, $L = 27.4$ nm, y ancho, $W = 25.8$ nm con una deformación gaussiana de amplitud, $A = 1.42$ nm, y ancho, $b = 4.3$ nm, y diferentes valores del campo magnético, B . La curva negra discontinua muestra la conductancia en ausencia de campo magnético externo y deformación	87
32	Mapas de la densidad local de estados a energía de Fermi, $E = 0.13$ eV, para una nanocinta con bordes zigzag (ZGNR) de longitud, $L = 27.4$ nm, y ancho, $W = 25.8$ nm con una deformación gaussiana de amplitud, $A = 1.42$ nm, y ancho, $b = 4.3$ nm, y diferentes valores del campo magnético, $B = 0$ T (panel a), $B = 10$ T (panel b), $B = 20$ T (panel c), $B = 30$ T (panel d).	88
33	Distribución espacial de la densidad local de estados a energía de Fermi, $E = 0.13$ eV para la subred A (panel a) y B (panel b), para una nanocinta con bordes <i>zigzag</i> (ZGNR) de longitud, $L = 27.4$ nm, y ancho, $W = 25.8$ nm con una deformación gaussiana de amplitud, $A = 1.42$ nm, y ancho, $b = 4.3$ nm, y campo magnético, $B = 10$ T. El panel c muestra la resta de ambas figuras, la polarización de pseudo-espín.	89

34	Diagrama del funcionamiento del dispositivo de bombeo de carga a través de un punto cuántico de Kouwenhoven <i>et al.</i> (1991). Los símbolos u_l y u_r son los potenciales electroquímicos de los reservorios izquierdo y derecho, respectivamente. El nivel de energía N indica la energía del N -ésimo electrón. Los paneles a-d son las cuatro fases del ciclo en el cual la probabilidad de tunear de un electrón es mayor si la barrera está abajo y menor si la barrera está arriba.	91
35	Diagrama del sistema físico. Una cadena unidimensional, de L sitios, conectada a reservorios infinitos en sus extremos. En el primer y último sitio se aplica un potencial armónico en el tiempo de amplitud V_0 , frecuencia Ω y fase relativa Δ . La conexión con los reservorios está mediada a través de la amplitud de tuneo W_0 . t_0 es la amplitud de tuneo entre los sitios de la cadena unidimensional.	96
36	Corriente de bombeo rectificadora, J_0 , como función del potencial químico de los reservorios. Los paneles superior e inferior corresponden a diferentes valores del acoplamiento con los contactos, $ W_0 ^2 = 0.1$ y $ W_0 ^2 = 0.5$, respectivamente. La amplitud de bombeo es $V_0 = 0.2$. Los diferentes colores de las curvas son para diferentes valores en la frecuencia de bombeo: la curva negra para $\Omega = 0.01$, rojo para $\Omega = 0.30$, verde para $\Omega = 0.45$ y azul para $\Omega = 0.60$. La fase entre los potenciales es medio periodo la energía de sitio del primer y último sitios es E_b , el ancho de banda de los contactos es $W = 4$ y el número de sitios es $L = 20$	97
37	Corriente de bombeo rectificadora como función de la frecuencia de bombeo, Ω , para diferentes valores del tuneo de acoplamiento con los contactos, w_0 . Los paneles superior e inferior muestran los resultado para amplitudes de la oscilación del potencial de bombeo, $V = 0.2$ y $V = 1$, respectivamente. . . .	98
38	Diagrama del sistema físico. Una cinta de grafeno –red hexágonal, de N_x sitios de longitud y N_y cadenas de ancho, conectada a reservorios infinitos de red cuadrada en sus extremos. En la primer y última columna de sitios se aplica un potencial armónico en el tiempo de amplitud V_0 , frecuencia Ω y fase relativa Δ . La conexión con los reservorios está mediada a través de la amplitud de tuneo W_0 . t_0 es la amplitud de tuneo entre los sitios dentro de la cinta de grafeno y t_r entre los sitios de los contactos.	100
39	Conductancia, G , como función del potencial químico en los contactos, para una nanocinta con $N_x = 20$ y $N_y = 2$ en el panel (a) y $N_y = 3$ en el panel (b). La curva negra continua es la conductancia para una nanocinta de red cuadrada con contactos de red cuadrada, la curva azul discontinua es para una nanocinta de grafeno con contactos de grafeno y la curva roja continua es para una nanocinta de grafeno con contactos de red cuadrada.	101
40	Corriente de bombeo rectificadora, J , como función del potencial químico en los contactos, para una nanocinta con $N_x = 20$ y $N_y = 2$ en el panel (a) y $N_y = 3$ en el panel (b). Las diferentes curvas son para diferentes valores de la frecuencia de bombeo: La curva negra es para $\Omega = 0.01$, roja discontinua para $\Omega = 0.3$, punteada azul para $\Omega = 0.45$ y continua azul para $\Omega = 0.6$. (Figura tomada de Kaur (2013))	102

- 41 Corriente de bombeo rectificada, J , como función de la frecuencia de bombeo, Ω , para una nanocinta con $N_x = 20$ y $N_y = 2$ en el panel (a) y $N_y = 3$ en el panel (b). La curva negra discontinua es para potencial químico nulo y la curva azul para potencial químico finito. (Figura tomada de Kaur (2013)) . . . 102

Capítulo 1

Introducción

Actualmente la tecnología del procesamiento de información está basada en dispositivos electrónicos. En estos se manipula la información a través de diferencias de potencial, traduciendo la presencia o ausencia de corriente de carga resultante en “ceros” y “unos” lógicos. La mayoría de estos sistemas físicos son dispositivos de estado sólido, entre los cuales destacan los transistores. Con los transistores se construyen los procesadores, que son los circuitos electrónicos que realizan las operaciones en las computadoras modernas. Cuanto mayor número de transistores hay en un procesador, mayor será su capacidad de procesar información. Así mismo se determina la velocidad de procesamiento. La estrategia tecnológica ha sido incrementar la densidad de transistores en los procesadores, esfuerzo que se conoce como miniaturización. Además de las complicaciones tecnológicas y de ingeniería que implica construir dispositivos de menor tamaño y mayor número de transistores, existen límites de otra índole. Por ejemplo, existen limitaciones impuestas por la mecánica cuántica, tales como el principio de incertidumbre de Heisenberg, o las limitaciones impuestas por el material, como la disipación de calor o las fluctuaciones de dopantes en los transistores. A pesar que puede que se continúe la miniaturización con la electrónica convencional, esto sólo puede durar una década más (Meindl *et al.*, 2001). Mientras tanto, continúa la búsqueda de paradigmas alternativos para la electrónica del futuro.

Una propuesta ha sido cambiar el enfoque actual y utilizar el grado de libertad de espín del electrón. Este campo se conoce como espintrónica y abarca una gran variedad de temas (Žutić *et al.*, 2004). Entre los éxitos de este campo, están la magneto-resistencia gigante y el asociado tuneo de magneto-resistencia gigante que ya se han utilizado con éxito en el almacenamiento de información. Otras propuestas han sido utilizar otros materiales para fabricar los dispositivos. Entre los candidatos prometedores está el grafeno.

La física del grafeno es otro campo que ha ganado un enorme interés tecnológico desde su descubrimiento por Novoselov *et al.* (2004). El grafeno es un material excepcional: es una red bidimensional hexagonal de átomos de carbono, cuya existencia se dudaba debido a la inestabilidad termodinámica que presentan los cristales bidimensionales. Su existencia se explica a través de estabilización via substrato o corrugaciones (Castro Neto *et al.*, 2009). La

Física de bajas energías en los electrones de grafeno está gobernada por la ecuación de Dirac, y por tanto presenta propiedades electrónicas únicas, tales como el efecto Hall cuántico anómalo –observable incluso a temperatura ambiente– y el tuneleo Klein (Castro Neto *et al.*, 2009). Más aún, el grafeno presenta movilidad electrónica excepcionalmente alta que se mantiene incluso a temperatura ambiente. Así, con el grafeno puede que sea posible construir transistores balísticos de efecto de campo a temperatura ambiente (existen algunos prototipos, por ejemplo Schwierz (2010)), permitiendo la operación a más altas frecuencias que los transistores convencionales (Wimmer, 2005).

Ya que el grafeno tiene solo un átomo de grosor, es propenso a deformaciones mecánicas. Dichas deformaciones afectan la dinámica de los electrones en grafeno. En particular las deformaciones elásticas se puede describir, en la aproximación de Dirac, como un pseudo campo vectorial con efecto similares a los de un campo magnético real. Se le conoce como pseudo campo magnético y puede dar lugar a niveles de Landau (Mucha-Kruczynski y Fal'ko, 2012) y efectos de interferencia como el Aharanov-Bohm (Vozmediano *et al.*, 2010).

En el presente trabajo de tesis doctoral estamos interesados en estudiar el transporte electrónico en nanocintas de grafeno en presencia de deformaciones. En particular deformaciones perpendiculares al plano y centro-simétricas. Este tipo de deformaciones pueden ser causadas con la punta de un microscopio de tuneleo (STM, por sus siglas en Inglés) o por la topografía del sustrato. Presentamos resultados para el transporte electrónico balístico a través de nanocintas de grafeno en presencia de deformaciones gaussianas. El formalismo utilizado fue el de la función de Green recursiva en equilibrio. Así mismo con el objetivo de estudiar a futuro la influencia una deformación gaussiana con amplitud dependiente del tiempo, estudiamos el bombeo cuántico en nanocintas de grafeno, obteniendo resultados preliminares. Para obtener resultado numéricos se utilizó el formalismo de las funciones de Green, específicamente el formalismo de Keldysh para hamiltonianos de pendientes del tiempo.

El presente trabajo de tesis está organizado como sigue. En el capítulo 2 describimos el formalismo utilizado para los cálculos numéricos: el formalismo de la función de Green dentro y fuera (Keldysh) de equilibrio, el método de la función de Green recursiva y el formalismo de Buttiker-Landauer. En el capítulo 3 se discute detalladamente el procedimiento de renormalización así como el método de evaluación desarrollado en este trabajo. En el capítulo 4 se revisan las propiedades electrónicas básicas, como la estructura de bandas, del grafeno. En el capítulo 5 presentamos y discutimos los resultados para el transporte en equilibrio a través de una nanocinta de grafeno con una deformación gaussiana fuera del plano en su

centro. En el capítulo 6 presentamos los resultados preliminares para el transporte asistido por potenciales dependientes del tiempo, bombeo cuántico, a través de una nanocinta de grafeno. Finalmente, en el capítulo 7 presentamos las conclusiones del trabajo de tesis así como algunas propuesta de trabajo a futuro.

Capítulo 2

Funciones de Green para el transporte electrónico

Se puede decir, que la ciencia de la materia condensada precede a la ciencia que describe sus constituyentes atómicos. Sin embargo, no fue hasta el siglo pasado que se desarrolló una formulación matemática del problema de muchos cuerpos (con grados de libertad del orden de 10^{23}) para describir una muestra macroscópica en términos de las propiedades de sus constituyentes (y las interacciones entre ellas). Existen dos clases fundamentales de propiedades que posee la materia condensada que se manifiestan debido al carácter colectivo: la primera es la existencia de propagación, la segunda son las transiciones de fase por las cuales la materia cambia sus simetrías fundamentales. Ambas involucran fenómenos de largo alcance, con distancias relevantes mucho mayores que el asociado al tamaño de sus constituyentes elementales.

En este trabajo estamos interesados en un fenómeno que se clasifica en la primera categoría, específicamente en la teoría de propagación o de transporte. En general, el cálculo de las propiedades de transporte de un sistema es un problema complejo, para el cual encontrar resultados exactos es prácticamente imposible (Rammer y Smith, 1986). Por tanto, en los cálculos de estas propiedades es necesario involucrar aproximaciones basadas en argumentos físicos. En nuestro caso, consideramos sistemas con alta densidad de electrones, en este límite el sistema puede modelarse en términos de partículas sin interacciones en un potencial efectivo —resultados de potenciales externos y de campo medio (Fetter y Walecka, 2003). La deducción de tales hamiltonianos escapa del alcance del presente trabajo, aquí nos limitaremos a utilizar modelos bien establecidos para estudiar nueva fenomenología.

Un formalismo natural para describir el transporte es el de las funciones de Green. Dentro de este, el transporte se describe a través de funciones de correlación (Doniach y Sondheimer, 1974), que son cantidades que describen la respuesta del sistema al añadir y luego retirar una partícula (o más). En particular, la formulación de la función de Green fuera de equilibrio (NEGF por sus siglas en inglés), desarrollada por Kadanoff y Baym (1962) y Keldysh (1965) y que permite considerar voltajes finitos e interacciones, se ha convertido en el método convencional. Los resultados centrales del formalismo de la NEGF pueden resumirse en unas cuantas ecuaciones, que se pueden implementar de manera conveniente en códigos computacionales,

por lo que ha sido ampliamente utilizada.

En este capítulo se describe el formalismo de la NEGF en equilibrio aplicado al transporte. La exposición se limita a presentar los resultados centrales y bosquejar la obtención de los mismos. En la sección 2.1 establecemos la notación y los conceptos básicos. En la sección 2.2 introducimos la teoría de las funciones de Green en equilibrio y en la sección 2.3 la función de Green fuera de equilibrio, también llamado formalismo de Keldysh. El formalismo de Landauer y su relación con las funciones de Green se describen en la sección 2.4. Finalmente, en la sección 2.5 presentamos el método utilizados para el cálculo de la función de Green en equilibrio.

2.1 Conceptos preliminares

Considere la ecuación de Schrödinger que describe la dinámica de una partícula de masa m_i ,

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle = H_i|\Psi\rangle \quad (1)$$

donde $H_i = \frac{p_i^2}{2m_i} + V_{ext}$ es el hamiltoniano, V_{ext} es el potencial (externo) y $|\Psi\rangle$ es el vector de estado asociado a la partícula. Se puede demostrar que las soluciones estacionarias son las eigenfunciones del operador hamiltoniano, dadas por,

$$H_i|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \quad (2)$$

Los vectores $|\psi\rangle$ forman una base completa para el espacio de Hilbert (\mathcal{H}_i), tal que cualquier estado posible para la partícula se puede escribir como una combinación lineal de ellos,

$$|\Psi\rangle = \sum_n C_n|\psi_n\rangle \quad (3)$$

En general, para los grados de libertad espaciales, es posible encontrar un subconjunto h de funciones en la base de posición, $\{|x\rangle\}$, o de momentos $\{|k\rangle\}$ que representa el espacio de Hilbert.

Considere un conjunto numerable de partículas idénticas, que de manera individual (y en ausencia de las otras), puedan describirse por la Ec. 1 –donde el grado de libertad de espín se toma implícito. En Mecánica Cuántica para describir tal sistema, se utiliza el espacio de Fock, \mathcal{F} . El espacio de Fock es el espacio generado por el producto de infinitos espacios de Hilbert (el espacio para describir individualmente una partícula),

$$\mathcal{H}^1 \times \mathcal{H}^2 \dots \mathcal{H}^i \times \dots \rightarrow \mathcal{F}. \quad (4)$$

Los elementos de este espacio son conjuntos ordenados de kets que describen cada una de las partículas,

$$|a\rangle \in \mathcal{F} \Rightarrow |a\rangle = (|\psi_1^a\rangle, |\psi_2^a\rangle, \dots) \quad (5)$$

Para simplificar la notación y utilizando el hecho de que las partículas son idénticas, cambiamos de representación. Describimos el estado del sistema especificando solo el número de partículas por estado en el espacio de Hilbert, utilizando cualesquiera base conveniente. Así si se usa la eigenbase $|\psi_n\rangle$ para describir el espacio de Hilbert, un estado del espacio de Fock sería,

$$|n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle, \quad (6)$$

donde la notación significa que hay n_1 partículas en el eigenestado ψ_1 , n_2 partículas en el eigenestado ψ_2 , etc. Al ser el espacio de Fock un espacio producto, hereda las propiedades del espacio de Hilbert (incluyendo las operaciones), de esta manera se cumple la ortogonalidad,

$$\langle n_1', n_2', \dots, n_\infty' | n_1, n_2, \dots, n_\infty \rangle = \delta_{n_1', n_1} \delta_{n_2', n_2} \dots \delta_{n_\infty', n_\infty} \quad (7)$$

(donde $\delta_{i,j}$ es la delta de Kronecker que es 1 si $i = j$ y 0 si $i \neq j$) y la completéz,

$$\sum_{n_1, n_2, \dots} |n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle \langle n_1', n_2', \dots, n_\infty'| = \mathbf{1}. \quad (8)$$

En realidad, no todos los estados del espacio de Fock son físicamente aceptables. Criterios de simetría ante la operación de intercambio, donde dos partículas cambian de orden en la descripción, junto con la condición de partículas idénticas, generan una clasificación de las partículas, en fermiones y bosones, que se manifiesta en presencia de otras iguales (impares e impares ante la operación de intercambio). En el caso particular de fermiones, esta simetría previene que dos partículas se encuentren en el mismo estado, reduciendo significativamente el número de estados en el espacio de Fock que son físicamente aceptables. Una manera práctica de incluir las restricciones de simetría de intercambio en los estados, que además simplifica la notación, es introducir nuevos operadores que actúan directamente en el espacio de Fock cambiando el número de partículas en un estado. Ya que estos operadores cambian el número de partículas reciben el nombre de operadores de creación y aniquilación.

Considere una base para los espacios de Hilbert individuales $\{|k\rangle\}$. Sea $|n_k\rangle$ un estado con n_k partículas en el estado $|k\rangle$ –en esta notación los estados no ocupados se obvian y no se escriben explícitamente los ceros. Definimos el operador de aniquilación, c_k , y su conjugado, el operador de creación, c_k^\dagger , que cumplen

$$\begin{aligned} [c_k, c_{k'}^\dagger] &= \delta_{k,k'}, & \{c_k, c_{k'}^\dagger\} &= \delta_{k,k'}, \\ [c_k, c_{k'}] &= [c_k^\dagger, c_{k'}^\dagger] = 0, & \{c_k, c_{k'}\} &= \{c_k^\dagger, c_{k'}^\dagger\} = 0, \end{aligned} \quad (9)$$

(izquierda para bosones y derecha para fermiones) y operan de la siguiente manera,

$$\begin{aligned} c_k^\dagger c_k |n_k\rangle &= n_k |n_k\rangle, \\ c_k |n_k\rangle &= (n_k)^{1/2} |n_k - 1\rangle, \\ c_k^\dagger |n_k\rangle &= (n_k + 1)^{1/2} |n_k + 1\rangle, \end{aligned} \quad (10)$$

sobre la eigenbase, tal que un estado se escribe,

$$|n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle = \left(c_1^\dagger\right)^{n_1} \left(c_2^\dagger\right)^{n_2} \dots \left(c_\infty^\dagger\right)^{n_\infty} |0\rangle. \quad (11)$$

Utilizando combinaciones lineales de estos operadores, definimos los operadores de campo,

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \sum_k \psi_k(\mathbf{x}) c_k, \quad \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_k \psi_k^\dagger(\mathbf{x}) c_k^\dagger, \quad (12)$$

donde los coeficientes ψ_k en la combinación lineal son las funciones de onda que resuelven el hamiltoniano de partícula simple en la representación considerada. En este ejemplo, los operadores de campo describen el número de partículas en una posición \mathbf{x} y los coeficientes ψ_k son las funciones de onda en el espacio real. Los operadores de la Ec. 12 nos permiten utilizar esta notación para describir el estado de un sistema de manera abstracta. A través de ellos podemos escribir las funciones de correlación conocidas como funciones de Green, que discutiremos en detalle más adelante.

2.2 Teoría de la función de Green en equilibrio

Definimos la función de de Green en equilibrio ordenada en el tiempo que describe a un sistema de muchas partículas a temperatura cero, como sigue,

$$G(x, t; x', t') = -\frac{i}{\hbar} \frac{\langle \Psi_0 | \mathcal{T}[\psi_H(x, t) \psi_H^\dagger(x', t')] | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle}, \quad (13)$$

donde, x y x' representan dos conjuntos con todas las coordenadas de las partículas, Ψ_0 es la función de onda del estado base, es decir $H|\Psi_0\rangle = E_0|\Psi_0\rangle$. \mathcal{T} es el operador de ordenamiento en el tiempo, que posiciona los operadores que aplican a tiempos posteriores a la izquierda de la siguiente manera: $\mathcal{T}\{A(t)B(t)\} = \theta(t - t')A(t)B(t') \mp \theta(t' - t)B(t')A(t)$. Aplicando el signo superior ($-$) para fermiones y el inferior ($+$) para bosones, proveniente del intercambio entre operadores y $\theta(t)$ es la función escalón. $\psi_H(x, t)$ es el operador de campo –definido anteriormente– en la representación de Heisenberg y cumple $\hat{\psi}(x, t) = e^{iHt/\hbar}\psi(x)e^{-iHt/\hbar}$.

Nos interesa reescribir la expresión para la función de Green de Ec.13 en la representación de interacción. Las diferentes representaciones, para la evaluación en el tiempo, surgen en

Mecánica Cuántica debido a que la conexión entre las cantidades físicas medibles y la teoría se realiza a través de los valores esperados. Estos tienen la siguiente estructura,

$$\langle A(t) \rangle = \langle \psi | U^\dagger(t) A U(t) | \psi \rangle, \quad (14)$$

posibilitando asociar la evolución temporal a los kets, a los operadores o ambos. La primera opción es conocida como la representación de Schrödinger, la segunda la de Heisenberg y la tercera es la representación de interacción. En la **representación de Schrödinger**, la dependencia temporal se asigna a las funciones de onda (kets) a través de la ecuación de Schrödinger $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_s(t)\rangle = H_s |\Psi_s(t)\rangle$, mientras los operadores se mantienen constantes. En la **representación de Heisenberg** las funciones de onda permanecen constantes en el tiempo, mientras los operadores evolucionan en el tiempo de acuerdo a la ecuación de Heisenberg, $\mathcal{O}(t) = e^{iHt/\hbar} \mathcal{O}(0) e^{-iHt/\hbar}$. Finalmente en la **representación de interacción** tanto la función de onda como los operadores evolucionan en el tiempo, como sigue: considere que el hamiltoniano total del sistema se puede escribir como la suma de dos operadores, $H = H_0 + V$, donde H_0 son los términos que no involucran interacciones entre partículas y V los términos de interacciones; entonces las funciones de onda evolucionan de acuerdo a

$$|\Psi_I(t)\rangle = \exp(iH_0 t/\hbar) \exp(-iHt/\hbar) |\Psi(0)\rangle, \quad (15)$$

y los operadores cumplen,

$$\mathcal{O}_I(t) = \exp(iH_0 t/\hbar) \mathcal{O} \exp(-iH_0 t/\hbar). \quad (16)$$

Para escribir la función de Green usando la representación de interacción, definimos el operador unitario de evolución temporal, U , dado por,

$$U(t) = \exp(iH_0 t/\hbar) \exp(iHt/\hbar), \quad (17)$$

que opera sobre los kets de estado haciéndoles evolucionar en el tiempo, $|\Psi\rangle = U(t) |\Psi(0)\rangle$. Introducimos la transformación unitaria $S(t, t') = U(t) U^\dagger(t')$, usualmente denominada matriz S , que transforma un estado a un tiempo t' al tiempo t ,

$$|\Psi(t)\rangle = S(t, t') |\Psi(t')\rangle. \quad (18)$$

La matriz S cumple la propiedad de grupo $S(t, t') = S(t, t'') S(t'', t')$. Podemos expresar la transformación S como un producto ordenado (Fetter y Walecka, 2003),

$$S(t, t') = \mathcal{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt_1 V(t_1) \right). \quad (19)$$

La definición de la función de Green en Eq.13 involucra el estado base en presencia de interacciones, $|\Psi\rangle$, –mismo que no conocemos–. Este último se puede escribir en términos del estado base del sistema sin interacciones $|\Phi_0\rangle$, definido por,

$$H_0|\Phi_0\rangle = E_0|\Phi_0\rangle. \quad (20)$$

La conexión entre $|\Phi_0\rangle$ y $|\Psi_0\rangle$ está dada por el teorema de Gell-Mann y Low (Fetter y Walecka, 2003):

$$|\Psi_0\rangle = S(0, -\infty)|\Phi_0\rangle. \quad (21)$$

La validez del teorema del Gell-Mann y Low se basa en la equivalencia entre la función de onda de un sistema con hamiltoniano H , a un tiempo $t = 0$, con otro con Hamiltoniano $H' = H_0 + V \exp[-\varepsilon|t|]$, siempre que $|t| \ll 1/\varepsilon$ (Fetter y Walecka, 2003). Para proceder con la escritura de la función de Green en la representación de interacción, es necesario expresar los operadores de campo en esta representación, $\Psi_I = \exp(iH_0t/\hbar)\Psi(0)\exp(-iH_0t/\hbar)$, entonces,

$$\Psi_H(x, t) = S(0, t)\Psi_I(x, t)S(t, 0). \quad (22)$$

Sustituyendo la expresión en Eq.22 y utilizando la propiedad de grupo en S , esto es $S(\infty, -\infty) = S(\infty, t)S(t, t')S(t', -\infty)$, la función de Green puede escribirse como:

$$G(x, t; x', t') = -i \frac{\langle \Phi_0 | T[S(\infty, -\infty)\hat{\psi}(x, t)\hat{\psi}^\dagger(x', t')] | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | S(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle}. \quad (23)$$

Para llevar a cabo cálculos con la Eq.23, se realiza un desarrollo perturbativo en \hat{V} de la matrix S (tanto en el numerador como en el denominador):

$$S(\infty, -\infty) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{n+1}}{n!} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \dots dt_n T[\hat{V}(t_1) \dots \hat{V}(t_n)]. \quad (24)$$

Dado que cada \hat{V} puede contener más de dos operadores de campo, es necesario un método para calcular valores esperados de la forma,

$$\langle \Phi_0 | T[\hat{\psi}(t)\hat{\psi}^\dagger(t')\hat{\psi}^\dagger(t_1)\hat{\psi}(t_1)\hat{\psi}(t_2)] | \Phi_0 \rangle, \quad (25)$$

así como términos similares de orden superior. Este tipo de expresiones se pueden evaluar utilizando el teorema de Wick (Fetter y Walecka, 2003), que establece una manera práctica para aplicar el operador de ordenamiento en el tiempo en este caso y así obtener valores esperados de pares de operadores. Estos términos pueden ser fácilmente expresados con diagramas de Feynman (Mattuck, 1992). Se puede probar que los diagramas desconexos

son cancelados por el denominador, y después de hacer un análisis combinatorio (Fetter y Walecka, 2003) se llega a que,

$$G(x, t; x', t') = -i \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 \dots dt_n \langle \Psi_0 | T \left[\hat{\psi}(x, t) \hat{\psi}^\dagger(x', t') \right. \\ \left. \times \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \dots \hat{V}(t_n) | \Phi_0 \rangle_{\text{conec}} \right], \quad (26)$$

donde el subíndice (conec) denota que la suma se realiza solo sobre los diagramas topológicamente diferentes y conexos. Debido a que en este caso el hamiltoniano no depende explícitamente del tiempo, existe invariancia ante traslaciones en el tiempo, la funciones de Green sólo dependen de la diferencia entre tiempos: $G = (x, x'; t - t')$ y podemos transformar en Fourier en la variable tiempo para obtener,

$$G(x, x'; E) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp\left(\frac{iE(t - t')}{\hbar}\right) G(x, x'; t - t'). \quad (27)$$

La expresión de la ec. 26 y su versión dependiente de la energía de la ec. 27 son el desarrollo perturbativo deseado, y es el punto de partida de la mayoría de los cálculos que usan el formalismo de la función de Green en equilibrio.

2.3 Formalismo de Keldysh: función de Green fuera de equilibrio

A continuación, después de haber revisado la teoría de la función de Green en equilibrio, discutiremos el formalismo de Keldysh (1965). Este formalismo es una extensión de la teoría de las funciones de Green (o de correlación) a problemas dependientes del tiempo. Este formalismo es general y puede aplicarse a un gran número de problemas físicos (Fetter y Walecka, 2003), en particular a la descripción del transporte electrónico en sistemas bidimensionales.

El formalismo para describir sistemas en equilibrio está basado en la equivalencia (a un tiempo t' y establecida por el teorema de Gell-Mann y Low) entre las correlaciones del estado base de un sistema en equilibrio con interacción entre partículas y las del estado base de un sistema auxiliar dependiente del tiempo en el que las interacciones han sido introducidas adiabáticamente desde $t \rightarrow -\infty$ (para después ser removidas de igual manera). La igualdad -hasta una fase- entre los estados base del sistema auxiliar a tiempos $t \rightarrow -\infty$ y $t \rightarrow +\infty$, permite calcular (perturbativamente) los valores esperados a partir del estado base sin interacciones. En el caso en el que hamiltoniano depende en el tiempo *per se*, esta equivalencia no se cumple. Por esta razón es necesario desarrollar un formalismo más general que permita tratar hamiltonianos dependientes del tiempo. Dicho formalismo se conoce como

formalismo de Keldysh. La idea fundamental del formalismo de Keldysh es definir un sistema auxiliar en el que las correlaciones no se calculan desde $t \rightarrow -\infty$ hasta $t \rightarrow +\infty$, pasando por $t = t'$; sino que se hace desde $t \rightarrow -\infty$ hasta $t = t'$ y de regreso a $t \rightarrow -\infty$. Los detalles de esta teoría y las herramientas necesarias para implementarlas al transporte se describen a continuación.

Considere un sistema físico cuyo hamiltoniano es independiente del tiempo y puede escribirse de la siguiente manera,

$$H = H_0 + H_i \quad (28)$$

donde H_0 es el hamiltoniano sin interacciones, o de partícula libre, y H_i son los términos de interacción, como la interacción electrón-electrón o electrón-fonón. En equilibrio termodinámico, el estado del sistema puede describirse a través del operador estadístico matriz de densidad ρ , dado por,

$$\rho(H) = \frac{\exp(-\beta H)}{\text{Tr}[\exp(-\beta H)]}, \quad (29)$$

donde $\beta \propto T^{-1}$, la constante de Boltzman y la velocidad de la luz se toman $\hbar = k_\beta = c = 1$ y hemos considerado el ensemble estadístico gran canónico. A continuación describimos el procedimiento usual para obtener un estado fuera de equilibrio a partir del estado en equilibrio. A tiempo t_0 , el sistema se desconecta del reservorio que lo mantenía a temperatura fija y sufre una perturbación dependiente del tiempo, representada en el hamiltoniano por $H'(t)$, tal que:

$$\mathcal{H}(t) = H + H'(t), \quad (30)$$

con $H'(t) = 0 \forall t < t_0$. El término que saca de equilibrio al sistema, H' , puede ser un campo eléctrico, una excitación de luz pulsada o el acoplamiento con contactos a diferente potencial químico. La mecánica estadística fuera de equilibrio se centra en calcular correlaciones (funciones de Green) y valores promedios $\langle O_{\mathcal{H}}(t) \rangle$ de observables físicas O , para tiempos $t > t_0$,

$$\langle O_{\mathcal{H}}(t) \rangle = \text{Tr}[\rho(H)O_{\mathcal{H}}(t)], \quad (31)$$

donde el subíndice denota que el operador está descrito en la representación de Heisenberg. Enfatizamos que en Ec. 31 se usa la matriz de densidad en equilibrio, $\rho(H)$, y no alguna ρ dependiente del tiempo. Físicamente, esto significa que los grados de libertad termodinámicos contenidos en $\rho(H)$ no siguen instantáneamente las rápidas variaciones de $H'(t)$. Algunas otras propuestas teóricas, en el llamado régimen transiente, son hoy en día objeto de investigación y están fuera de los objetivos del presente trabajo (Jauho *et al.*, 1994).

Como se discutió anteriormente, en situación de equilibrio la cantidad central es la matriz $S(-\infty, +\infty)$. Fuera de equilibrio no existe garantía de que el sistema regresará al estado

de equilibrio después de aplicar y retirar la perturbación. De esta manera construimos un formalismo más general, calculamos correlaciones en un sistema donde se toma el estado inicial en $t = t_0$, se le aplican las interacciones dependientes del tiempo y se estudia su evolución a $t > t_0$. Posteriormente, el sistema se regresa en el tiempo hasta llegar a $t = t_0$.

Definimos,

$$H'_H(t) = \exp[iH(t - t_0)]H'(t)\exp[-iH(t - t_0)], \quad (32)$$

que es el operador $H'(t)$ en la representación de interacción. De manera correspondiente, el operador

$$V_H(t, t_0) = \mathcal{T}\{\exp[-i \int_{t_0}^t dt' H'_H(t')]\}, \quad (33)$$

con \mathcal{T} el operador de ordenamiento temporal, que mueve a la izquierda los operadores a tiempos posteriores. El operador V transforma un operador en la representación de interacción y lo lleva a la representación de Heisenberg, explícitamente,

$$O_{\mathcal{H}}(t) = V_H^\dagger(t, t_0)O_H V_H(t, t_0). \quad (34)$$

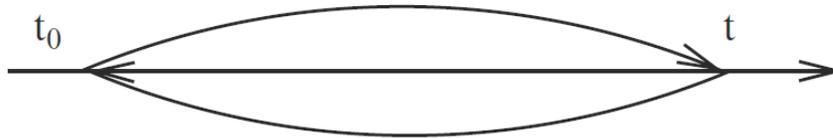


Figura 1. Contorno C_t .

La expresión en Ec. 34 puede ser reescrita definiendo un contorno complejo de integración en el tiempo. La figura 1 muestra de manera esquemática el contorno que parte desde t_0 y regresa a t_0 , pasando por t . Agregamos a la variable t un infinitesimal imaginario $\pm i\eta$ que indica, según el signo, si se está realizando la integral en el tiempo de ida o de regreso (+ para ida y - de regreso). Ello nos lleva a trabajar con la variable de tiempo complejo $\tau = t + i\eta$. Además, definimos al operador de ordenamiento en el tiempo sobre el contorno C_t , como \mathcal{T}_{C_t} . Finalmente, podemos reescribir Ec. 34 como sigue,

$$O_{\mathcal{H}}(t) = \mathcal{T}_{C_t}\{\exp[-i \int_{C_t} d\tau H'_H(\tau)]O_H(t)\}. \quad (35)$$

Usaremos la convención de utilizar letras griegas para denotar tiempos en el contorno complejo, mientras para tiempos en el eje real se denotarán con letras romanas. El operador de ordenamiento en el tiempo sobre un contorno complejo es una herramienta formal que nos

permite desarrollar la teoría de las funciones de Green fuera de equilibrio en una manera paralela al formalismo en equilibrio.

Definimos ahora la función de Green ordenada sobre el contorno C , como sigue,

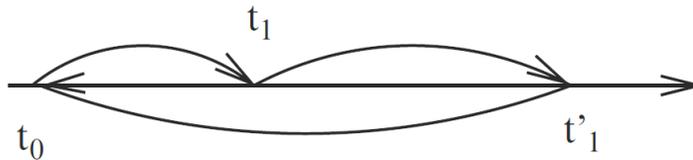


Figura 2. Contorno C .

$$G(x_1, t_1; x_{1'}, t_{1'}) \equiv -\frac{i}{\hbar} \langle \Phi_0 | \mathcal{T}_C [\hat{\psi}_{\mathcal{H}}(x_1, t_1) \hat{\psi}_{\mathcal{H}}^\dagger(x_{1'}, t_{1'})] | \Phi_0 \rangle, \quad (36)$$

donde el contorno C inicia y termina en t_0 (eventualmente haremos tender $t_0 \rightarrow -\infty$), pasando una sola vez por t_1 y t'_1 (como se indica en Fig.2). Para hacer más clara la notación obviaremos el estado Φ y las variables espaciales, así $x_1, t_1 \rightarrow t_1$ y $x_{1'}, t_{1'} \rightarrow t'_1$, para quedar,

$$G(t_1, t'_1) = -\frac{i}{\hbar} \langle \mathcal{T}_{C_\nu} [\hat{\psi}_{\mathcal{H}}(t_1) \hat{\psi}_{\mathcal{H}}^\dagger(t'_1)] \rangle. \quad (37)$$

La función de Green ordenada en contorno, al igual que la función casual, satisface la ecuación de Dyson:

$$\begin{aligned} G(t_1, t'_1) &= G_0(t_1, t'_1) + \int d^3x_2 \int_{C_\nu} d\tau_2 G_0(t_1, t_2) U(t_2) G(t_2, t'_1) \\ &+ \int d^3x_2 \int d^3x_3 \int_{C_\nu} d\tau_2 \int_{C_\nu} d\tau_3 G_0(t_1, t_2) \Sigma(t_2, t_3) G(t_3, t'_1). \end{aligned} \quad (38)$$

donde U es la parte fuera de equilibrio que no involucra interacciones entre partículas (potencial externo de partícula simple) y Σ es el término de autoenergía, debido a las interacciones entre partículas o interacciones entre distintos tipos de partículas (tipo electrón-fonón por ejemplo). Así mismo, esta función de Green tiene un rol en la teoría fuera de equilibrio similar al de la función de Green causal en la teoría en equilibrio; puede desarrollarse perturbativamente utilizando un teorema de Wick. Sin embargo, ya que el contorno temporal posee dos ramas, es importante denotar en cual de las dos se encuentra el tiempo en cuestión. Eso se hace con el signo de la parte imaginaria de la variable τ . Sin embargo, la representación en contorno temporal es impráctica para realizar cálculos. Por esta razón, se requiere escribir las funciones de Green en términos de variables de tiempo real, guardando el orden de contorno. Este procedimiento se conoce como continuación analítica (Kadanoff y Baym, 1962) y consiste en definir nuevas funciones de Green, definidas sobre tiempos reales, que cubren los diferentes casos que se pueden dar: los dos tiempos en la rama superior, uno en la superior y otro en la inferior, etc.

Para simplificar, fijamos $t_0 \rightarrow -\infty$. Si las interacciones se acoplan adiabáticamente, las contribuciones del dominio $[t_0, t_0 - i\beta]$ se anulan. Así el contorno consiste en dos partes $[-\infty, \infty]$ y $[+\infty, -\infty]$ (véase Fig.2.3), que llamaremos C_1 y C_2 , respectivamente. Cualquier tiempo residiendo en la primera parte (C_1) acontece antes en el contorno que cualquier tiempo en el segundo contorno (C_2). Así, la función de Green ordenada en contorno contiene cuatro diferentes funciones definidas sobre tiempos reales, explícitamente,

$$G(t_1, t'_1) = \begin{cases} G_c(t_1, t'_1) = -\frac{i}{\hbar} \langle T[\hat{\psi}_{\mathcal{H}}(t_1)\hat{\psi}_{\mathcal{H}}^\dagger(t'_1)] \rangle & \text{si } t_1, t'_1 \in C_1, \\ G^>(t_1, t'_1) = -\frac{i}{\hbar} \langle \hat{\psi}_{\mathcal{H}}(t_1)\hat{\psi}_{\mathcal{H}}^\dagger(t'_1) \rangle & \text{si } t_1 \in C_2 \wedge t'_1 \in C_1, \\ G^<(t_1, t'_1) = +\frac{i}{\hbar} \langle \hat{\psi}_{\mathcal{H}}(t'_1)\hat{\psi}_{\mathcal{H}}^\dagger(t_1) \rangle & \text{si } t_1 \in C_1 \wedge t'_1 \in C_2, \\ G_{\bar{c}}(t_1, t'_1) = -\frac{i}{\hbar} \langle \tilde{T}[\hat{\psi}_{\mathcal{H}}(t_1)\hat{\psi}_{\mathcal{H}}^\dagger(t'_1)] \rangle & \text{si } t_1, t'_1 \in C_2, \end{cases} \quad (39)$$

donde G_c es la función casual o ordenada en el tiempo, $G^>$ es la función mayor, $G^<$ es

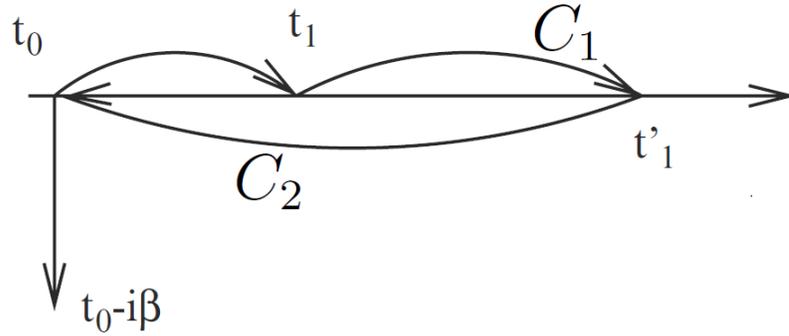


Figura 3. Contornos para C_1 y C_2

la menor y $G_{\bar{c}}$ es la función anti-ordenada en el tiempo. Los operadores \mathcal{T} y $\tilde{\mathcal{T}}$ son los operadores de ordenamiento y anti-ordenamiento en el tiempo, respectivamente, y actúan de la siguiente manera,

$$\begin{aligned} \mathcal{T}[\hat{\psi}_{\mathcal{H}}(t_1)\hat{\psi}_{\mathcal{H}}^\dagger(t'_1)] &= \theta(t_1 - t'_1)\langle \hat{\psi}_{\mathcal{H}}(t_1)\hat{\psi}_{\mathcal{H}}^\dagger(t'_1) \rangle - \theta(t'_1 - t_1)\langle \hat{\psi}_{\mathcal{H}}^\dagger(t'_1)\hat{\psi}_{\mathcal{H}}(t_1) \rangle, \\ \tilde{\mathcal{T}}[\hat{\psi}_{\mathcal{H}}(t_1)\hat{\psi}_{\mathcal{H}}^\dagger(t'_1)] &= \theta(t'_1 - t_1)\langle \hat{\psi}_{\mathcal{H}}(t_1)\hat{\psi}_{\mathcal{H}}^\dagger(t'_1) \rangle - \theta(t_1 - t'_1)\langle \hat{\psi}_{\mathcal{H}}^\dagger(t'_1)\hat{\psi}_{\mathcal{H}}(t_1) \rangle. \end{aligned} \quad (40)$$

Ya que, $G_c + G_{\bar{c}} = G^> + G^<$, podemos definir otro par de funciones de Green útiles para la conexión con experimentos,

$$\begin{aligned} G^a(t_1, t'_1) &= \theta(t_1 - t'_1)[G^<(t_1, t'_1) - G^>(t_1, t'_1)], \\ G^r(t_1, t'_1) &= \theta(t'_1 - t_1)[G^>(t_1, t'_1) - G^<(t_1, t'_1)], \end{aligned} \quad (41)$$

llamadas funciones de Green retardada y avanzada, respectivamente. Además se cumple, $G^r - G^a = G^> - G^<$. Al trabajar con la fórmula de Dyson de Ec. 38, es necesario realizar continuación analítica de multiplicaciones de operadores de la forma $C = AB$, y/o de orden

superior. El teorema de Langreth provee las reglas necesarias para desarrollar dichos términos (Haug y Jauho, 2007). A continuación ejemplificamos su uso y mostramos sus principales resultados.

Considere la función C con la siguiente estructura,

$$C(t_1, t'_1) = \int_c d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1), \quad (42)$$

donde la integración es sobre el contorno complejo, C . Nos interesa escribir el desarrollo de la convolución C en términos de las cantidades A y B en variables de tiempo real. Para poner un ejemplo concreto, considere que t_1 está en la primera parte del contorno C , es decir pertenece a C_1 y que t'_1 pertenece a la segunda parte (inferior) de C (C'_1). Entonces como t_1 siempre ocurre primero que t'_1 , en términos de variables reales, la convolución es menor ($<$). Primero dividimos la integral por contornos, explícitamente

$$C^<(t_1, t'_1) = \int_{C_1} d\tau A(t_1, \tau) B^<(\tau, t'_1) + \int_{C'_1} d\tau A^<(t_1, \tau) B(\tau, t'_1). \quad (43)$$

Considere la primera integral. En esta integral, sobre el contorno C_1 , se le ha puesto el superíndice menor, $<$, a B para indicar que τ siempre ocurre antes que t'_1 –pues t'_1 está en el segundo contorno. A la cantidad A no se le asigna aún ninguna etiqueta pues el orden dependerá de los valores específicos de t_1 y τ . Luego sumamos y restamos convenientemente la integral, desde t_1 a $-\infty$, sobre el mismo término $AB^<$. Lo anterior es equivalente a deformar el contorno C como se muestra en la Fig. 2.3. Entonces, utilizando la definición de la función retardada, se obtiene convenientemente,

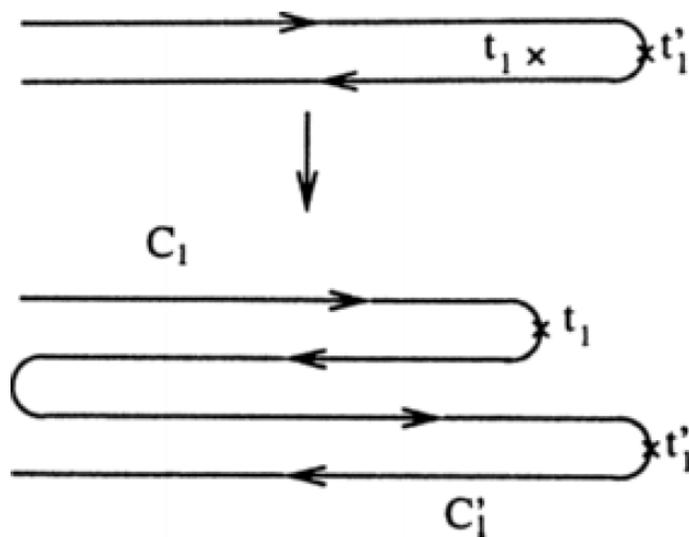


Figura 4. Deformación del contorno c

$$\begin{aligned}
\int_{C_1} d\tau A(t_1, \tau) B^<(\tau, t'_1) &= \int_{-\infty}^{t_1} dt A^>(t_1, t) B^<(t, t'_1) + \int_{t_1}^{-\infty} dA^<(t_1, t) B^<(t, t'_1) \\
&\equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt A^r(t_1, t) B^<(t, t'_1).
\end{aligned} \tag{44}$$

Un análisis similar se puede realizar con la segunda integral asociada con el contorno c_2 , para finalmente obtener,

$$C^<(t_1, t'_1) = \int_{-\infty}^{\infty} dt [A^r(t_1, t) B^<(t, t'_1) + A^<(t_1, t) B^a(t, t'_1)]. \tag{45}$$

Este resultado aplica también para la función "mayor" ($>$), si se intercambian los $<$ por $>$. El desarrollo en la Ec. 45 puede generalizarse a productos de tres: Si $D = ABC$ está definido sobre el contorno complejo, en el eje real resultará en,

$$D^< \equiv A^r B^r C^< + A^r B^< C^a + A^< B^a C^a. \tag{46}$$

Donde otra vez el resultado puede utilizarse para funciones mayores ($>$), con las apropiadas modificaciones. El teorema de Langreth incluye otros desarrollos que se pueden obtener realizando la continuación analítica de manera similar (Jauho *et al.*, 1994). En particular nos interesa aplicar la continuación analítica a la ecuación recursiva de Dyson, Ec.38, y obtenemos,

$$G^< = G_0^< + G_0^r \Sigma^r G^< + G_0^r \Sigma^< G^a + G_0^< \Sigma^a G^a. \tag{47}$$

Note que en esta ecuación se tiene $G^<$ en ambos lados. Se puede sustituir la ecuación en si misma para obtener un desarrollo que se puede escribir de manera compacta como sigue (Jauho *et al.*, 1994),

$$G^< = (1 + G^r \Sigma^r) G_0^< (1 + G^a \Sigma^a) + G^r \Sigma^< G^a. \tag{48}$$

Este procedimiento se puede aplicar en la función de Green retardada, resultando en,

$$G^r = G_0 + G^r \Sigma^r G^0. \tag{49}$$

Las ecuaciones 48 y 49 se conocen como ecuaciones de Keldysh y son el punto de partida de la mayoría de cálculos con funciones de Green (Jauho *et al.*, 1994).

2.4 Formalismo de Landauer y la relación con la función de Green

Un parámetro importante para tomar en cuenta en el diseño de dispositivos es la conductancia: ella caracteriza la conducción eléctrica a través del conductor. En esta sección revisaremos de manera general un método para obtener la conductancia en sistemas mesoscópicos –lo

que se conoce como transporte coherente o balístico. En particular estudiaremos el enfoque de Landauer en donde la corriente que fluye en un conductor es proporcional a la probabilidad de que un electrón se transmita a través de él. Además, revisaremos la conexión de este formalismo con la matriz de dispersión y la función de Green del sistema.

2.4.1 La conductancia

Macroscópicamente, en un conductor es posible relacionar la corriente eléctrica I con la diferencia de potencial V que la genera, a través de la famosa ley de Ohm,

$$I = \frac{V}{R}, \quad (50)$$

en donde la resistencia R varía de un conductor a otro, y caracteriza la geometría del conductor, así como al material del que está hecho. Usualmente se reescribe la ley de Ohm en términos de la conductancia G (del vocablo *gate* en inglés),

$$I = GV, \quad (51)$$

donde $G = \frac{1}{R}$. De nuevo, la conductancia caracteriza la geometría y el material del conductor. Por ejemplo, se puede demostrar que para una placa rectangular bidimensional, la conductancia es proporcional a su anchura W , e inversamente proporcional a su longitud L , esto es,

$$G = \sigma \frac{W}{L}, \quad (52)$$

donde el factor de proporcionalidad σ es la conductividad. Ella es una propiedad intrínseca del material e independiente de las dimensiones del conductor. Uno se puede preguntar si la relación para la conductancia se cumple independientemente de las dimensiones de la placa, o dicho de otro modo, cual es el rango de validez de la relación en Ec. (52). La respuesta a esta pregunta involucra conocer el origen de la conductividad, ¿qué es lo que hace que varíe de un material a otro?, así como entender los fenómenos de la conducción, la interacción de los electrones con el material, etc.

A partir de la década de los años 80's, se hizo posible la fabricación de pequeños dispositivos conductores, y con ello el estudio experimental del significado de la resistencia a nivel microscópico. Lo que emergió en este proceso es el marco teórico conceptual para describir el flujo de corriente a escalas de longitud menores que el camino promedio, lo que se conoce como transporte en sistemas mesoscópicos. Se les denomina mesoscópicos a los sistemas cuyas dimensiones están entre las macroscópicas y las microscópicas: son mucho más grandes que los objetos microscópicos como los átomos, pero no lo suficientemente grandes para mostrar

un comportamiento óhmico (de acuerdo con la ecuación (50)). Un conductor usualmente muestra un comportamiento óhmico si sus dimensiones son mucho mayores que cada una de las tres longitudes características:

1. La longitud de onda de De Broglie λ_B , que está relacionada con la energía cinética de los electrones.
2. El camino libre promedio, l_s que es la distancia que un electrón recorre antes de cambiar su momento inicial debido a colisiones.
3. La longitud de relajación de fase, l_ϕ que es la distancia que un electrón viaja antes de que su fase inicial sea destruida.

Estas escalas de longitud varían de un material a otro y son fuertemente influenciadas por la temperatura, el campo magnético, etc. Debido a esta variabilidad, los fenómenos mesoscópicos han sido observados en conductores que van desde pocos nanómetros a miles de micrómetros, y que pueden estar fabricados de diversos materiales: por ejemplo, pueden consistir en un conductor plano al que se le hace un patrón de litografía, en un gas bidimensional de electrones formado en una heteroestructura de GaAs-AlGaAs, o incluso en estructuras de carbono como el grafeno o los nanotubos.

Entre las características más importantes de los conductores mesoscópicos están, por supuesto, aquellas relacionadas con la respuesta a campos eléctricos, y ellas son, además de las longitudes características, i) la movilidad μ , que está definida en el modelo de Drude como la razón entre la velocidad v_F a la que se mueven los electrones en presencia de un campo eléctrico constante y la magnitud de este campo; ii) la masa efectiva m^{ast} , ella resume el efecto de la red periódica atómica que forma al conductor y varía de un material a otro; iii) la densidad de portadores n_s , que en el caso de semiconductores es crucial para el transporte y se puede relacionar con la velocidad de Fermi, $n_s = \frac{(v_f m)^2}{2\pi \hbar^2}$, y con la longitud de onda $\lambda_F = \sqrt{\frac{2\pi}{n_s}}$. No obstante, la mejor caracterización de la respuesta de un conductor a campos electromagnéticos es a través de la conductancia G , definida en la ecuación (51) –o alguna similar. Una discusión más profunda en el significado de la conductancia puede encontrarse en libro de Datta (1995).

2.4.2 El formalismo de Landauer

En la subsección anterior, señalamos la relevancia de la conductancia en la caracterización de los conductores y hemos definido las longitudes características con las cuales se han de comparar las dimensiones de los conductores para determinar si son mesoscópicos. En esta subsección presentaremos la deducción de expresiones para la conductancia en conductores mesoscópicos rectangulares con múltiples terminales (conexiones), utilizando el enfoque de Landauer y siguiendo el desarrollo de Datta (1995)

Supongamos un conductor rectangular con anchura W y longitud L . Se sabe que si estas dimensiones son grandes en comparación con las longitudes características, la conductancia estará dada por la ecuación (52). Si esta relación óhmica se mantuviera aun para dimensiones pequeñas, la conductancia crecería indefinidamente mientras se reduce la longitud de la placa. Sin embargo, mediciones experimentales muestran que la conductancia tiende a un valor constante, digamos G_c , cuando la longitud del conductor se vuelve menor que el camino libre promedio. La desviación del comportamiento con respecto al predicho en la ecuación (52) es de esperarse: esta relación se obtiene al considerar las colisiones de los electrones –con átomos de impurezas o defectos en el orden cristalino– como el origen de la resistencia; sin embargo, cuando las longitudes del conductor son menores que el camino libre promedio ($W, L \ll l_s$), las colisiones ya no son relevantes en la conducción, por lo que la relación (52) no debe mantenerse.

El que la conductancia tienda a un valor finito, implica que la resistencia es diferente de cero, aún para longitudes menores que el camino libre promedio. El origen de esta resistencia está ligado al procedimiento de medición: para realizarla se disponen dos contactos (1 y 2) a diferentes energías potenciales (μ_1 y μ_2) en los extremos del conductor (véase figura (5a)); ya que estos contactos están hechos de un material diferente al del conductor, se forma una interfaz entre los materiales. La presencia de esta interfaz genera la resistencia $\frac{1}{G_c}$. Usualmente se le refiere a esta resistencia como resistencia de contacto. Así que, aunque podría suponerse que un conductor con estas características la resistencia es cero porque no hay dispersión en el interior del mismo, la forma en que se realiza la medición origina la introducción de una resistencia de contacto. Cuando un conductor puede describirse a través de las consideraciones anteriores, *i.e.* tiene dimensiones comparables con sus longitudes características, y además no presenta dispersión inelástica (con pérdida de energía), se dice que este conductor es balístico (Datta, 1995).

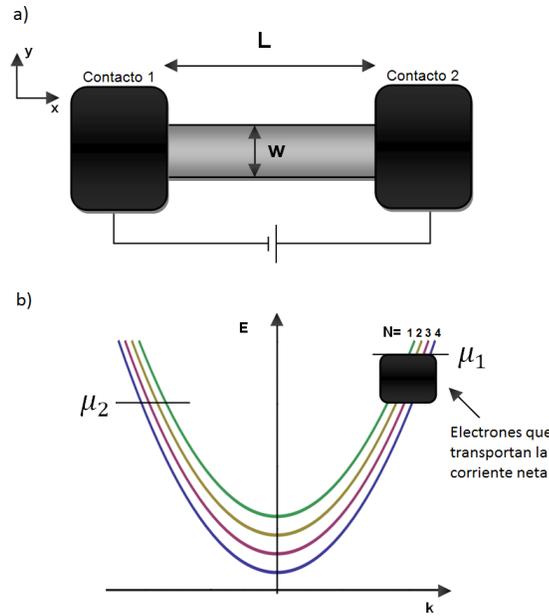


Figura 5. a) Conductor en medio de dos contactos a diferentes potenciales, los contactos se asumen no reflejantes. b) Relaciones de dispersión para los modos dentro del conductor. (basada en la figura original de Datta (1995))

Cálculo de la resistencia de contacto

Es posible calcular la resistencia de contacto G_c^{-1} si se considera un conductor balístico y se calcula la corriente a través de él mientras se dispone una diferencia de energía potencial entre los contactos $\mu_1 - \mu_2$. El cálculo se vuelve particularmente sencillo si se consideran contactos no reflejantes, es decir, contactos en los que un electrón proveniente del conductor entrará en ellos sin reflexión alguna. El considerar contactos no reflejantes es equivalente a decir que son mucho más anchos que el conductor y que la energía de los electrones incidentes no está próxima al nivel más bajo de la banda en la que se mueven. Dicho de otro modo, los contactos tienen tantos estados ocupados que aunque tienen números cuánticos distintos de los correspondientes en el sistema central, siempre es posible armar una combinación lineal en el contacto que representa un autoestado del sistema central y por tanto no reflejan.

Si los contactos son no reflejantes, los estados en el conductor con momento positivo $+\hbar k$ estarán ocupados por electrones provenientes del contacto de la izquierda, mientras que los estados con momento negativo $-\hbar k$ estarán ocupados por electrones provenientes del contacto de la derecha. Ello porque todos los electrones que llegan a un contacto son absorbidos por él, es decir no son reflejados hacia dentro del conductor de nuevo. De esta manera, los estados $+k$ en el conductor están poblados hasta la energía de Fermi F^+ , que es igual al potencial en

el contacto de la izquierda $F^+ = \mu_1$; y de la misma manera la energía de Fermi F^- para los estados $-k$ en el conductor es igual a μ_2 –el potencial de la derecha– (Veáse la figura (5b)).

Ya que existe un confinamiento en la dirección y , para una k (en la dirección x) dada, existen diferentes valores de la energía total, E , asociados a los diferentes eigenestados causados por el confinamiento en y . A estos eigenestados se les conoce como modos transversales o subbandas. La presencia de modos genera múltiples relaciones de dispersión como las de la figura (5b), en donde la separación entre ellas está dada por el espectro energético de los eigenestados en la dirección y .

Cada modo tiene una relación de dispersión tipo partícula libre (véase la figura 5a) y una energía de corte,

$$\varepsilon_n = E(N, k = 0), \quad (53)$$

debajo de la cual no puede propagar. El número de modos transversales que contribuyen a la conducción, a una energía E dada, se obtiene contando el número de modos cuya energía de corte ε_n es menor que E :

$$M(E) = \sum_N \theta(E - \varepsilon_N). \quad (54)$$

Podemos evaluar la corriente transportada por cada modo transversal y sumarla sobre todos los modos.

Consideremos un único modo transversal, en él los estados con momento positivo $+k$ están ocupados de acuerdo a alguna función $f^+(E)$. Se sabe que un gas de electrones uniforme con n electrones por unidad de longitud moviéndose con una velocidad v , transporta una corriente igual a env , y la densidad electrónica asociada con un sólo estado k en un conductor de longitud L es $\frac{e}{L}$. Por lo tanto, podemos escribir la corriente I^+ transportada por los estados $+k$ como,

$$I^+ = \frac{e}{L} \sum_k v(k) f^+(E(k)) = \frac{e}{L} \sum_k \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k} f^+(E(k)). \quad (55)$$

Asumiendo condiciones de frontera periódicas, considerando la degeneración del espín y convirtiendo la suma sobre k en integral, se obtiene,

$$I^+ = \frac{2e}{h} \int_{\varepsilon}^{\infty} f^+(E) dE, \quad (56)$$

donde ε es la energía de corte del modo. Se puede extender este resultado para multi-modos y escribir la corriente, I^+ , transportada por los estados k^+ en un conductor como,

$$I^+ = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} f^+(E) M(E) dE, \quad (57)$$

donde $M(E)$ (definida en la ecuación 54) nos dice el número de modos con energía de corte menor a la energía E . Este resultado general es independiente de la relación de dispersión $E(k)$ del sistema: la corriente transportada por cada modo por unidad de energía es igual a $\frac{2|e|}{h}$ (que es aproximadamente 80 nA/meV).

Si se supone que el número de modos M es constante sobre el rango de energías $\mu_1 > E > \mu_2$, podemos escribir

$$I^+ = \frac{2e^2}{h} M \frac{(\mu_1 - \mu_2)}{e}, \quad (58)$$

y entonces

$$G_c = \frac{2e^2}{h} M, \quad (59)$$

tal que la resistencia de contacto está dada por,

$$G_c^{-1} = \frac{h}{2e^2 M} \approx \frac{12.9 \text{ k}\Omega}{M}. \quad (60)$$

La expresión anterior muestra que la resistencia es inversamente proporcional al número de modos. En el caso de conductores con anchuras macroscópicas, el número de modos es muy grande y la resistencia de contacto muy pequeña, por lo que ésta se vuelve indetectable.

Para calcular el número de modos $M(E)$ es necesario conocer las energías de corte para los diferentes modos ε_n ; ello implica resolver la ecuación de Schrödinger para la coordenada y , considerando el potencial de confinamiento $U(y)$ y un posible campo magnético. No obstante, en el caso de ausencia de campo magnético, la naturaleza precisa del potencial de confinamiento no es tan relevante, sólo nos interesa el número de modos. Se puede estimar el número de modos considerando fronteras periódicas. En este caso los valores permitidos de k_y están espaciados por $\frac{2\pi}{W}$, con cada valor de k_y correspondiente a un modo transversal diferente y W el ancho del conductor. A energía E_F ($= \frac{\hbar k_F^2}{2m}$), un modo puede propagar sólo si $-k_f < k_y < k_f$. Entonces el número de modos propagantes puede escribirse como,

$$M = \text{Int} \left[\frac{k_F W}{\pi} \right] = \text{Int} \left[\frac{W}{\lambda_F/2} \right], \quad (61)$$

donde $\text{Int}(x)$ representa el entero inmediato inferior a x . Por ejemplo si se asume la longitud de onda de Fermi de 30 nm, el número de modos en un dispositivo de 15 μm es aproximadamente 1000, tal que la resistencia de contacto es alrededor de 12.5 Ω (véase ecuación 60).

La ecuación 59 para la conductancia en función del número de modos puede ser generalizada al caso en el que el conductor presenta un coeficiente de transmisión diferente de 1,

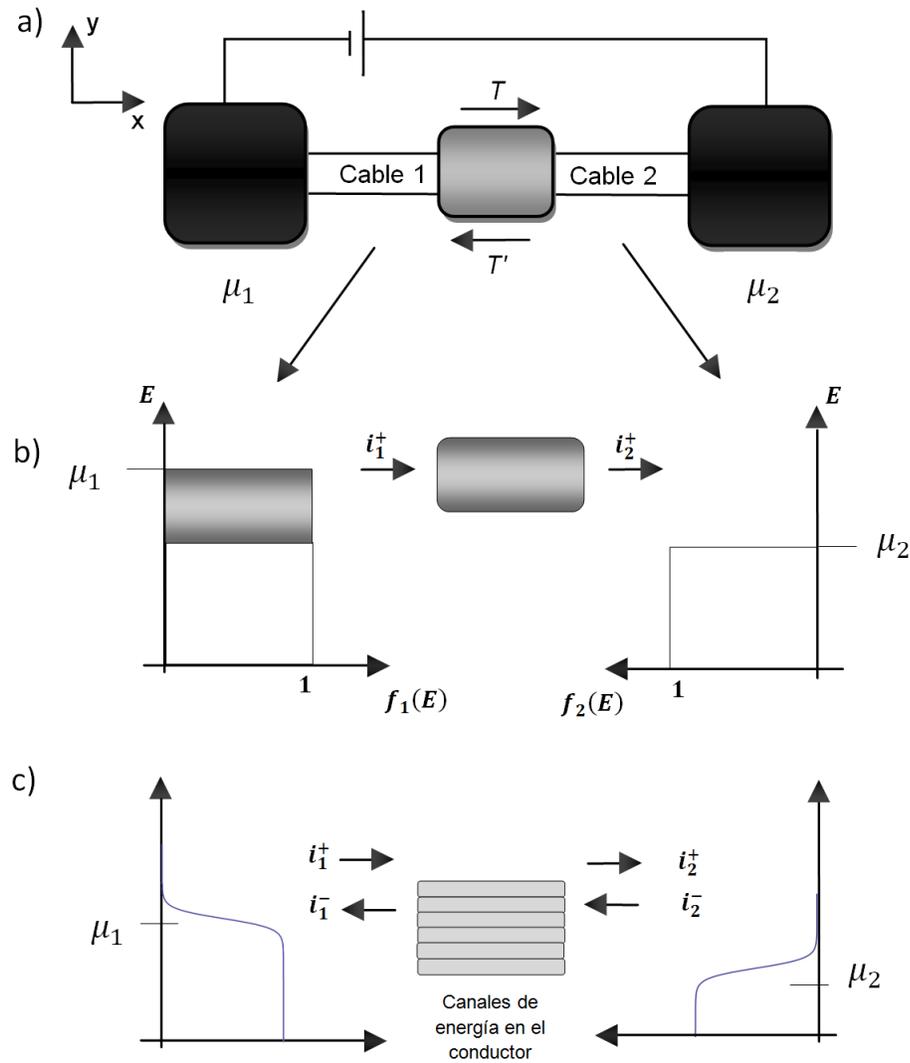


Figura 6. a) Conductor conectado a dos grandes contactos a través de dos cables. b) Distribución de energía de los electrones incidentes en ambos cables a temperatura cero. c) Distribuciones de energía para temperatura diferente de cero.

i.e. cuando los electrones tienen una probabilidad diferente de cero de ser reflejados dentro del conductor. Para realizar esta generalización consideramos un conductor conectado a dos grandes contactos por dos cables como se muestra en la figura 6 a). Estos cables se asumen como conductores balísticos, cada uno con M modos transversales. El electrón tiene una probabilidad promedio T de transmitirse del cable 1 al cable 2. Se asumen contactos no reflejantes, tal que los estados $+k_x$ en el cable 1 están ocupados sólo por electrones del contacto de la izquierda y por tanto tienen una energía igual a μ_1 , que es la energía de este contacto. Lo mismo para los estados $-k_x$ en el cable 2 –que vienen del contacto de la derecha con energía μ_2 .

Considerando temperatura cero, el flujo de corriente es sólo entre el rango de energía que

va desde μ_1 a μ_2 . De esta manera, el flujo entrante de electrones del cable 1 está dado por (véase ecuación 58),

$$I_1^+ = (2e/h) M [\mu_1 - \mu_2], \quad (62)$$

el flujo saliente del cable 2 es simplemente el flujo entrante en el cable 1 veces la probabilidad de transmisión T :

$$I_2^+ = (2e/h) MT [\mu_1 - \mu_2], \quad (63)$$

el resto del flujo es reflejado de regreso al contacto 1:

$$I_1^- = (2e/h) M (1 - T) [\mu_1 - \mu_2], \quad (64)$$

y el flujo neto de corriente I en cualquier punto del dispositivo está dado por:

$$I = I_1^+ - I_1^- = I_2^+ = (2e/h) MT [\mu_1 - \mu_2]. \quad (65)$$

Por lo tanto la conductancia es igual a

$$G = \frac{I}{\frac{(\mu_1 - \mu_2)}{|e|}} = \frac{2e^2}{h} MT. \quad (66)$$

La ecuación (66) se conoce como fórmula de Landauer, y es la generalización para la fórmula de la conductancia al caso de conductores con coeficiente de transmisión T .

Los resultados plasmados en las ecuaciones 65 y 66 han sido corroborados experimentalmente. Se han realizado experimentos en metales desde finales de los años 60's –los primeros fueron realizados por los investigadores Yu. V. Sharvin y N. I. Bogatina (1969) – generalmente utilizando contactos puntuales para crear una constricción.

En el caso de metales, la longitud de onda de Fermi es del orden de la distancia entre átomos, por lo que el número de modos en estas constricciones es muy grande, lo que resulta en resistencias relativamente pequeñas; sin embargo, en semiconductores la longitud de onda de Fermi es típicamente del orden de 30 nm; tal que el factor $k_F W$ puede hacerse muy pequeño. Además, existen sistemas físicos en los que se pueden construir contactos con la longitud de onda de Fermi asociada comparable con la abertura del contacto, es decir con el tamaño de la contricción o ancho del conductor. Por ejemplo, en el gas de electrones bidimensional (2DEG) que se forma en la interfaz de GaAs-AlGaAs, la longitud de onda de Fermi de los electrones es cientos de veces mayor que la de los electrones en un metal. Esto hace posible estudiar constricciones con aberturas comparables con su longitud de onda asociada (mucho más pequeña que el camino libre promedio para dispersión por impurezas). Tales

constricciones se conocen como contactos cuánticos puntuales. (Van Houten y Beenakker 1996).

Un contacto cuántico puntual (QPC, por sus siglas en inglés) se puede construir de la modificación del gas bidimensional de electrones que se forma en la interfaz de GaAs-AlGaAs. Para ello se colocan contactos sobre la interfaz para generar un potencial –voltaje de compuerta– en el 2DEG. La figura 7 muestra el esquema de un punto cuántico puntual formado con este tipo confinamiento.

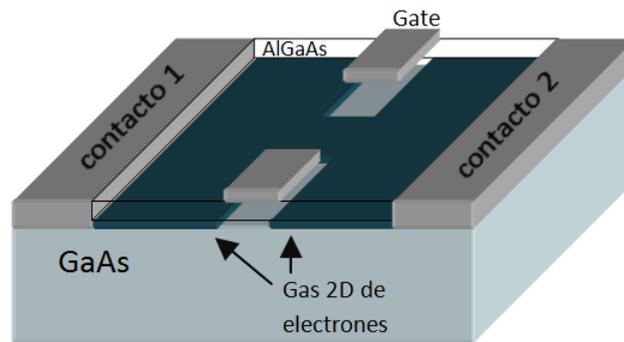


Figura 7. Esquema de un contacto cuántico puntual. En sombra se muestra la región del gas bidimensional de electrones, sobre de él los dos contactos que generan el voltaje de compuerta. (Extraído de Van Houten y Beenakker, 1996).

Los primeros experimentos en semiconductores fueron reportados en 1988 por dos grupos diferentes de investigadores (Van Wees *et al* (1988); Wharam *et al* (1988)), quienes publicaron el descubrimiento de una secuencia de escalones en la gráfica de la conductancia de un QPC –formado en un 2DEG– como función del voltaje de compuerta (*Gate Voltage*), es decir del tamaño del QPC (véase figura 8). Este fenómeno se conoce como cuantización de la conductancia. Representa un soporte experimental firme para la fórmula de Landauer, que relaciona la conductancia con la amplitud de transmisión (véase ecuación (66)) y se puede explicar de manera elemental considerando que, al variar el tamaño del QPC, aumenta el número de estados accesibles para los electrones dentro del mismo, y por tanto, el número de canales de transmisión, modificando así la conductancia. Cada vez que un nuevo estado es accesible, la conductancia da un salto de $2\frac{e^2}{h} \approx \frac{1}{13k\Omega}$, formando la serie de escalones mencionada anteriormente (Van Houten y Beenakker 1996).

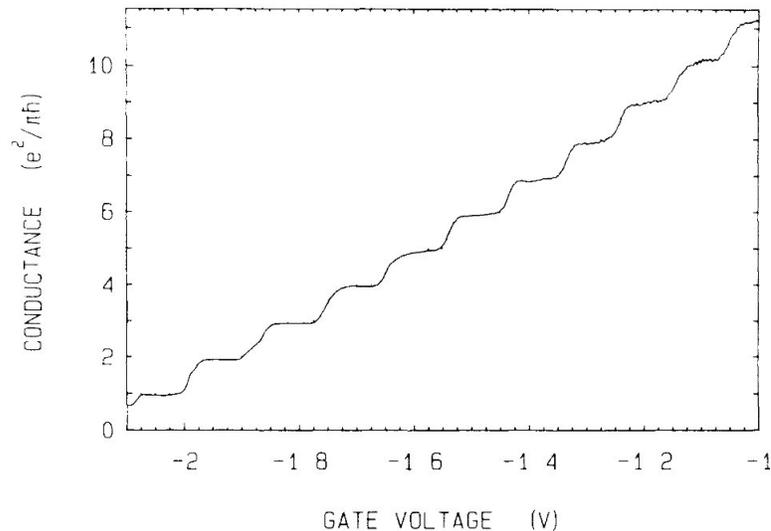


Figura 8. Conductancia de un contacto cuántico puntual como función del voltaje de compuerta. La conductancia presenta escalones asociados a los estados transversales en el dispositivo. (tomada de van Wees *et al.* (1988))

Efectos de temperatura finita

La derivación anterior de la fórmula de Landauer se simplificó porque se asumió temperatura cero, tal que el transporte ocurría sólo del contacto 1 al 2 y no del 2 al 1 (véase figura 6b); además se supuso que la corriente era transportada por un solo canal de energía cercano a la energía de Fermi. Estas consideraciones permitieron escribir la corriente como,

$$I = \frac{2e}{h} \bar{T} [\mu_1 - \mu_2], \quad (67)$$

donde \bar{T} denota el producto del número de modos M por la probabilidad de transmisión T a la energía de Fermi (que se asume constante en el rango de energía $\mu_1 > E > \mu_2$).

En general el transporte se lleva a cabo a través de múltiples canales de energía en el rango,

$$\mu_1 + (\alpha k_B T) > E > \mu_2 - (\alpha k_B T), \quad (68)$$

donde α es un parámetro del orden de 1 y cada canal puede tener una transmisión \bar{T} diferente. La figura 6 c) muestra un esquema de la situación. Considerando de esta manera el efecto de la temperatura, la corriente puede ser deducida con un método similar al de la sección anterior

Sea f_i la función de distribución de Fermi en el cable i -ésimo. El flujo entrante de

electrones por unidad de energía provenientes del cable 1 está dado por:

$$i_1^+(E) = \left(\frac{2e}{h}\right) M f_1(E), \quad (69)$$

mientras que el flujo entrante del cable 2 está dado por (M' es el número de modos en el cable 2),

$$i_2^-(E) = \left(\frac{2e}{h}\right) M' f_2(E). \quad (70)$$

Análogamente, el flujo saliente del cable 1 es

$$i_1^-(E) = (1 - T) i_1^+(E) + T' i_2^-(E), \quad (71)$$

mientras el flujo saliente del cable 2 está dado por,

$$i_2^+(E) = T' i_1^+(E) + (1 - T') i_2^-(E). \quad (72)$$

Por tanto la corriente neta $i(E)$ a través del dispositivo es:

$$i(E) = \frac{2e}{h} [M(E) T(E) f_1(E) - M'(E) T'(E) f_2(E)], \quad (73)$$

definiendo $\bar{T}(E) = M(E) T(E)$ y asumiendo que $\bar{T}(E) = \bar{T}'(E)$ –pues consideramos la probabilidad de transmisión igual del contacto 1 al contacto 2, que al revés–, podemos reescribir la expresión anterior y encontrar la corriente total,

$$I = \int i(E) dE, \quad (74)$$

donde

$$i(E) = \frac{2e}{h} \bar{T}(E) [f_1(E) - f_2(E)]. \quad (75)$$

2.4.3 Aproximación de respuesta lineal

De las ecuaciones anteriores vemos que cuando los contactos están al mismo potencial ($\mu_1 = \mu_2$) la corriente en el dispositivo se anula. Para pequeñas desviaciones del estado de equilibrio (contactos equipotenciales), la corriente es proporcional al voltaje aplicado. De la ecuación (75) podemos escribir,

$$\delta I = \frac{2e}{h} \int \left([\bar{T}(E)]_{eq} \delta [f_1 - f_2] + [f_1 - f_2]_{eq} \delta [\bar{T}(E)] \right) dE. \quad (76)$$

Es evidente que el segundo término dentro del paréntesis se anula, pues las funciones de distribución en equilibrio son iguales. El primer término se puede simplificar utilizando un desarrollo en serie de Taylor a primer orden

$$\delta [f_1 - f_2] \approx [\mu_1 - \mu_2] \left(\frac{\partial f}{\partial \mu} \right)_{eq} = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) [\mu_1 - \mu_2], \quad (77)$$

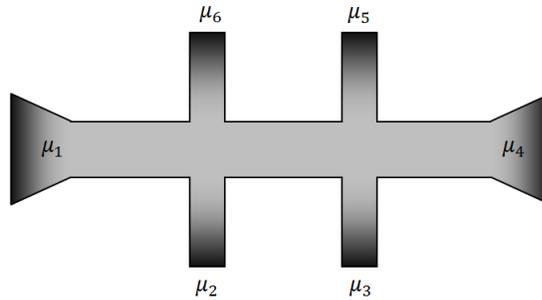


Figura 9. Diagrama de un conductor con geometría Hall con múltiples contactos.

donde $f_0(E)$ es la función de equilibrio de Fermi

$$f_0(E) = \left[\frac{1}{\exp\left(\frac{(E-\mu)}{k_B T}\right) + 1} \right]_{\mu=E_f} . \quad (78)$$

Sustituyendo estos resultados en la ecuación 75 podemos obtener una expresión para la conductancia en respuesta lineal a temperatura diferente de cero:

$$G = \frac{\delta I}{(\mu_1 - \mu_2)/e} = \frac{2e^2}{h} \int \bar{T}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (79)$$

En el límite de baja temperatura la derivada de la función de Fermi puede aproximarse como proporcional a la función delta de Dirac, pues la función de distribución de Fermi tiende a la función escalón, tal que se recupera la ecuación 66, pero para múltiples modos:

$$G = \frac{2e^2}{h} \bar{T}(E_f). \quad (80)$$

Debido a la utilización de la aproximación en serie de Taylor mostrada en la ecuación 77, se puede inferir que la validez de las fórmulas anteriores (*i.e.* la respuesta lineal) está limitada a diferencias de potenciales entre los contactos mucho menores que la energía térmica, es decir $(\mu_1 - \mu_2) \ll k_B T$. Sin embargo, se puede demostrar que la condición anterior es suficiente más no necesaria para tener respuesta lineal. De hecho, la respuesta permanecerá lineal si la función de transmisión $\bar{T}(E)$ es aproximadamente constante –sobre el rango de energía donde ocurre el transporte– e independiente de la diferencia de energías entre los contactos.

2.4.4 Büttiker-Landauer: múltiples contactos

Hasta el momento hemos considerado conductores conectados sólo a dos terminales –o contactos–, sin embargo, muchos de los experimentos y los dispositivos de interés constan de

conductores con múltiples terminales, por ejemplo los puentes Hall (véase figura 9). Büttiker notó que en el caso de dispositivos con terminales múltiples se puede utilizar la superposición de corriente, y así escribir la corriente en cada terminal como

$$I_p = \int i_p(E) \, dE, \quad (81)$$

donde

$$i_p(E) = \frac{2e}{h} \sum_q [\bar{T}_{qp}(E) f_p(E) - \bar{T}_{pq}(E) f_q(E)], \quad (82)$$

con $\bar{T}_{pq}(E)$ la transmisión total de la terminal q a la terminal p , a energía E ; $f_p(E)$ es la función de Fermi para la terminal p . En el caso de equilibrio, las funciones deben de satisfacer la regla de la suma,

$$\sum_q \bar{T}_{qp}(E) = \sum_p \bar{T}_{pq}(E), \quad (83)$$

pues la corriente debe anularse. Para energías cercanas al equilibrio podemos escribir la corriente para cada terminal en la forma

$$i_p(E) = \frac{2e}{h} \sum_q \bar{T}_{pq}(E) [f_p(E) - f_q(E)]. \quad (84)$$

Esta expresión puede linealizarse de la misma manera en que se hizo para la corriente en un conductor con dos terminales y se obtiene,

$$I_p = \sum_q G_{pq} [V_p - V_q], \quad (85)$$

donde

$$G_{pq} = \frac{2e^2}{h} \int \bar{T}_{pq}(E) \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \, dE, \quad (86)$$

ó en el límite de bajas temperaturas,

$$G_{pq} = \frac{2e^2}{h} \bar{T}_{pq}(E_f). \quad (87)$$

Los resultados anteriores se conocen como el formalismo de Büttiker-Landauer. Éste provee un marco riguroso para la descripción del transporte mesoscópico, siempre que el transporte sea coherente. Para transporte no coherente, el formalismo como tal sigue siendo válido, excepto si el transporte involucra un flujo vertical de electrones de una energía a otra, ya que el principio de exclusión se hace relevante y hay que meterlo en la descripción. Existen formulaciones que amplían este resultado en este y otros casos más generales (véase por ejemplo Haug y Jauho (2007)).

2.4.5 Función de Transmisión y Matriz \mathbf{S}

En la sección anterior hemos establecido que existe una cantidad llamada función de transmisión, en términos de la cual obtenemos el flujo de corriente a través de un conductor. En esta sección estudiaremos cómo calcular la función de transmisión cuando las dimensiones del conductor son mucho menores que la longitud de relajación de fase, es decir para transporte en el régimen coherente. En este régimen, podemos relacionar la función de transmisión con la matriz de dispersión \mathbf{S} , y así calcular la función de transmisión a partir de la ecuación de Schrödinger.

Un conductor coherente puede caracterizarse por una matriz \mathbf{S} –función de la energía–. La matriz \mathbf{S} relaciona las amplitudes de las ondas entrantes en cada cable del sistema con las de las ondas salientes. Cada modo puede transmitir una onda entrante y una saliente, de tal forma que si M_T es el número total de modos en el sistema, la matriz de dispersión tendrá dimensiones de $M_T \times M_T$. Sea $M_p(E)$ el número de modos propagantes en el cable p -ésimo a una energía E dada. Entonces el número total de modos se puede obtener sumando los modos de cada cable,

$$M_T(E) = \sum_p M_p(E). \quad (88)$$

En principio podemos calcular la matriz \mathbf{S} partiendo de la ecuación de Schrödinger en aproximación de masa efectiva,

$$\left[E_n + \frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m} + U(x, y) \right] \Psi(x, y) = E\Psi(x, y), \quad (89)$$

si conocemos el potencial vectorial \mathbf{A} y la energía potencial $U(x, y)$ dentro del conductor con E_n la energía de la banda asociada con la coordenada z . Existen diferentes métodos para hacerlo, algunos aproximados, pero por el momento vamos a suponerla conocida.

La probabilidad de transmisión T_{nm} se obtiene tomando la magnitud cuadrada del correspondiente elemento de la matriz \mathbf{S} :

$$T_{mn} = |s_{mn}|^2. \quad (90)$$

En general nos interesa encontrar la función de transmisión entre modos $\bar{T}_{pq}(E)$. Para obtenerla hay que sumar la probabilidad de transmisión T_{nm} sobre todos los m modos en el q -ésimo cable y todo los n modos en el p -ésimo cable:

$$\bar{T}_{pq} = \sum_{m \in q} \sum_{n \in p} T_{nm}, \quad (91)$$

donde la dirección de propagación va del segundo subíndice al primero. Las ecuaciones anteriores nos dan la relación entre la matriz de dispersión y la función de transmisión.

2.4.6 Combinación de matrices \mathbf{S}

En general, para encontrar la matriz de dispersión es necesario invertir una matriz de $M_T \times M_T$, con M_T el número de modos totales. En la práctica para calcular la matriz de dispersión del sistema usualmente se divide el sistema en regiones, digamos 1 y 2 (o más), se calcula la matriz de dispersión individual $\mathbf{S}^{(1)}$ y $\mathbf{S}^{(2)}$, y se les combina para obtener la matriz total del sistema,

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}^{(1)} \otimes \mathbf{S}^{(2)}. \quad (92)$$

La combinación anterior se puede realizar de manera coherente o incoherente, lo que repercutirá en la expresión para la transmisión total del sistema.

2.4.7 Relación con las funciones de Green

La matriz \mathbf{S} resume la respuesta en un cable dada la excitación en otro. La función de Green es más general: relaciona la respuesta en cualquier punto (dentro y fuera del conductor) debido a una perturbación en otro punto. Para transporte sin interacción, las únicas excitaciones que son consideradas en el cálculo son las ondas incidentes de los cables. Para tales excitaciones, las funciones de Green, introducidas en las secciones 2.2 y 2.3, y la matriz \mathbf{S} son conceptos relacionados, y la elección de una u otra es cuestión de gusto. El poder real de las funciones de Green es evidente cuando se incluyen efectos de interacción (electrón-electrón o electrón-fonón), pues estas interacciones dan origen a excitaciones dentro del conductor y no pueden ser descritas en términos de simples matrices \mathbf{S} .

Siempre que la respuesta R esté relacionada a una excitación S , a través de un operador diferencial \mathbf{D} , tal que,

$$\mathbf{D}R = S, \quad (93)$$

podemos definir una función de Green y expresar la respuesta en la forma siguiente,

$$R = \mathbf{D}^{-1}S = GS, \quad (94)$$

con $G \equiv \mathbf{D}^{-1}$.

En el caso de la ecuación de Schrödinger,

$$[E - \mathbf{H}] \Psi = S, \quad (95)$$

donde Ψ es la función de onda, y S un término de excitación –equivalente a una onda incidente en uno de los cables, la función de Green correspondiente es,

$$G = [E - \mathbf{H}]^{-1}, \quad (96)$$

donde \mathbf{H} es el hamiltoniano con la energía de sub-banda E_s asociada a la coordenada z incluida como parte del potencial, explícitamente:

$$\mathbf{H} = \frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m} + U(\mathbf{r}). \quad (97)$$

El operador diferencial inverso no está especificado unívocamente hasta que se especifican las condiciones de frontera. Las dos diferentes posibilidades dan origen a dos funciones de Green diferentes: la función de Green avanzada y la retardada. Sin embargo, sólo esta última cumple con la condición de causalidad, por lo que es la que en general se utiliza. La elección se puede hacer explícita adicionando un término infinitesimal complejo $i\eta$ al hamiltoniano. Haciendo lo anterior, la función de Green retardada es,

$$G^r = [E - \mathbf{H} + i\eta]^{-1}, \quad (98)$$

y su complejo conjugado,

$$G^A = [E - \mathbf{H} - i\eta]^{-1}, \quad (99)$$

es la función de Green avanzada. Ambas son soluciones de una ecuación diferencial de la forma,

$$\left(E - U_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \pm i\eta \right) G(x, x') = \delta(x, x'). \quad (100)$$

Usualmente se denota como función de Green a la retardada, obviando la elección de la condición de frontera.

El cálculo de la función de Green en sistemas altamente simétricos es relativamente sencillo. Un ejemplo de esto es el cable infinito con multimodos, en donde para obtener la función de Green del sistema sólo hay que escribirla como combinación lineal de funciones de partícula libre multiplicadas por las funciones de los modos transversales, y aplicar condiciones de continuidad para calcular los coeficientes de la combinación lineal. Ello nos lleva a obtener, después de varios pasos intermedios,

$$G^r(x, y; x', y') = \sum_m \frac{-i}{\hbar v_m} \chi_m(y) \chi_m(y') \exp[ik_m |x - x'|] \quad (101)$$

donde se ha definido $k_m = \frac{\sqrt{2m(E - \varepsilon_{m0})}}{\hbar}$, $v_m \equiv \frac{\hbar k_m}{m}$ y las $\chi_m(y)$ y ε_{m0} representan las eigenfunciones y las eigenenergías de los modos transversales (Datta, 1995).

Si las eigenfunciones y las eigenenergías del hamiltoniano se conocen,

$$\mathbf{H}\psi_\alpha(\mathbf{r}) = \varepsilon_\alpha\psi_\alpha(\mathbf{r}), \quad (102)$$

es posible expresar la función de Green como una combinación lineal de eigenfunciones del hamiltoniano, y calcular coeficientes tales que se satisfaga la ecuación de Green 100. Siguiendo este procedimiento se obtiene el desarrollo usual de la función de Green como producto de las eigenfunciones:

$$G^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_\alpha \frac{\psi_\alpha(\mathbf{r})\psi_\alpha^*(\mathbf{r}')}{E - \varepsilon_\alpha + i\eta}. \quad (103)$$

Para realizar cálculos de transporte utilizando la función de Green –en el enfoque de Landauer– es necesario conectarla con la función de transmisión. Esto se logra a través de la relación de Fisher-Lee (Lee y Fisher, 1981), que conduce a una ecuación entre los elementos de la matriz de dispersión \mathbf{S} con la función de Green retardada G^r del sistema:

$$s_{nm} = \delta_{nm} + i\hbar\sqrt{\nu_n\nu_m} \int \int \chi_n(y_q) [G_{qp}^r(y_q; y_p)] \chi_m(y_p) dy_q dy_p, \quad (104)$$

donde χ_n es el n -ésimo modo transversal, ν_n la velocidad asociada a este modo y y_p es la coordenada asociada al p -ésimo cable. Con la matriz de dispersión se puede calcular la conductancia a través de la fórmula de Landauer (véase ecuaciones 79 y 80).

2.5 Determinación de la función de Green

2.5.1 Aproximación de amarre fuerte

Cuando el conductor tiene una forma arbitraria, encontrar la función de Green significa resolver la ecuación diferencial

$$[E - H(\mathbf{r}) + i\eta]G^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (105)$$

con

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m} + U(\mathbf{r}), \quad (106)$$

para $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ y $U(\mathbf{r})$ arbitrarios.

Un procedimiento común para la solución de la ecuación diferencial (105) es discretizar la coordenada espacial. Esto permite transformar la función de Green en una matriz (Ferry *et al.*, 2009),

$$G^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rightarrow G^r(i, j), \quad (107)$$

donde los índices i, j denotan los puntos en red discreta espacial. Estos puntos en la red discreta bien pueden significar puntos de una discretización artificial, lo que se conoce como método de diferencias finitas, o átomos reales de un material (Davies, 1998). En este último caso la aproximación de amarre fuerte puede hacerse más detallada, incluir las diferentes bandas, términos de interacción espín-órbita (Mireles y Kirczenow, 2002), etc. En esta sección realizaremos la derivación como si se tratase de diferencias finitas, sin embargo en la literatura hay diversos ejemplos donde la aproximación de amarre fuerte se utiliza para representar átomos reales. Un ejemplo en particular y de interés para el presente trabajo, es el grafeno (véase por ejemplo Castro Neto *et al.* (2009)) que discutiremos en el siguiente capítulo. Además, en este análisis nos restringiremos al caso de conductores bidimensionales; sin embargo, la generalización a tres dimensiones es directa. Con la discretización, la ecuación diferencial se convierte en una ecuación matricial, por lo que encontrar la función de Green se traduce en la inversión de una matriz, explícitamente:

$$[(E + i\eta)\mathbf{I} - H]G^r = \mathbf{I}. \quad (108)$$

En esta ecuación, \mathbf{I} es la matriz identidad y H el hamiltoniano en la base discreta cuyos elementos están dado por:

$$H_{ij} = \begin{cases} U(r_i) + zt, & \text{si } i = j; \\ -\tilde{t}_{ij}, & \text{si } i, j \text{ son primeros vecinos;} \\ 0, & \text{otro caso,} \end{cases} \quad (109)$$

donde z es el número de primeros vecinos, r_i es el vector posición en la red de sitios, t es el parámetro de tuneo ($t = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$) y el parámetro,

$$\tilde{t}_{ij} = t \exp \left[\frac{ie\mathbf{A} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}{\hbar} \right], \quad (110)$$

se conoce como acoplamiento entre primeros vecinos y contiene al potencial vectorial \mathbf{A} evaluado en el punto medio entre los sitios i y j , esto es, en $\frac{(\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j)}{2}$.

Resolviendo la ecuación (108) se llega a que la función de Green es la matriz dada por

$$G^r = [(E + i\eta)\mathbf{I} - H]^{-1}. \quad (111)$$

En sistemas abiertos el espacio a discretizar es infinito, entonces la matriz hamiltoniana tiene un número infinito de elementos, y por tanto es imposible invertir el término $[(E + i\eta)\mathbf{I} - H]$ para encontrar la función de Green. Si por otro lado –para hacer soluble la inversión– se trunca la matriz, se estará resolviendo un sistema cerrado con fronteras reflejantes –y no un

sistema abierto. Para utilizar la discretización y solucionar este problema, el procedimiento usual es dividir el sistema en regiones. Ya que usualmente sólo se requieren los elementos de la función de Green que describen la región central. Separamos el sistema físico en tres regiones: contacto izquierdo, región central y contacto derecho, como se muestra en la Fig. 10.

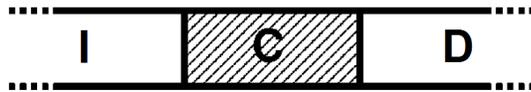


Figura 10. División del sistema físico en regiones.

Sea $\epsilon = E + i\eta$, entonces podemos reescribir la ecuación 111 de la siguiente manera,

$$\begin{pmatrix} G_I & G_{IC} & G_{ICD} \\ G_{CI} & G_C & G_{CD} \\ G_{IDC} & G_{DC} & G_D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\epsilon - H_I) & h_{IC} & 0 \\ h_{IC}^\dagger & (\epsilon - H_C) & h_{CD} \\ 0 & h_{CD}^\dagger & (\epsilon - H_D) \end{pmatrix}^{-1} \quad (112)$$

donde la matriz $(\epsilon - H_C)$ representa un conductor finito aislado, mientras $(\epsilon - H_{\{I,D\}})$ representa los contactos infinitos y h_{IC} y h_{CD} son las matrices de acoplamiento que serán diferente de cero solo entre puntos adyacentes (aproximación de amarre fuerte) en el conductor y los contactos izquierdo y derecho, respectivamente. De esta ecuación se obtiene de manera inmediata,

$$G_C = (\epsilon - H_C - \Sigma_I - \Sigma_D)^{-1}, \quad (113)$$

donde hemos definido,

$$\Sigma_I = h_{IC}^\dagger g_I h_{IC}, \quad (114)$$

y

$$\Sigma_D = h_{DC} g_D h_{DC}^\dagger, \quad (115)$$

como las auto-energías debido a los contactos semi-infinitos y $g_{\{I,D\}} = (\epsilon - H_{\{I,D\}})^{-1}$ son las funciones de Green de los contactos. Las matrices Σ tienen el mismo rango que la matriz H_C . Esta función de Green, G_C , representa la propagación de los electrones entre dos puntos dentro del conductor tomando en cuenta el efecto de los cables a través de los términos de autoenergía Σ 's. Con esta división, para la obtención de la función de Green es necesaria la determinación de las autoenergías asociadas a los contactos.

Obtención de las autonergías

Para encontrar la función de Green dentro del conductor incluyendo los contactos es necesario encontrar su autoenergía asociada, (Σ_p) –donde p refiere al contacto, I o D . Existen diferentes métodos para encontrar ésta autoenergía, ellos dependen de la naturaleza de los contactos. Usualmente esto se hace considerándolos como regiones rectangulares semi-infinitas, en cuyo caso su función de Green se puede calcular analíticamente y expresar en la forma cerrada:

$$g_p^r(p_i, p_j) = -\frac{1}{t} \sum_m \chi_m(p_i) \exp[ik_m a] \chi_m(p_j), \quad (116)$$

donde la función real $\chi_m(y_p)$ describe el perfil transversal del modo m en el cable p con momento asociado k_m , cumpliendo las condiciones de contorno que definen el sistema semi-infinito. Sustituyendo la ecuación anterior en Ec. 114 o 115 para la autonergía debido a los cables y considerando $h_{IC} = h_{CD} = -t$, obtenemos:

$$\Sigma_p^r(i, j) = -t \sum_{m \in p} \chi_m(p_i) \exp[+ik_m a] \chi_m(p_j). \quad (117)$$

Es posible estudiar el efecto de la autoenergía de los cables en los eigenestados. La expresión (113) para la función de Green dentro del conductor puede verse como la función de Green de un sistema con operador diferencial $H_C + \Sigma^r$ y ecuación asociada,

$$[H_C - \Sigma^r] \psi_\alpha = \varepsilon_\alpha \psi_\alpha. \quad (118)$$

La diferencia de esta ecuación con una ecuación estacionaria de Schrödinger es que el operador diferencial no es hermitiano y por tanto tiene un espectro *de energía* complejo:

$$\varepsilon_\alpha = \varepsilon_{\alpha 0} - \Delta_\alpha - i\gamma_\alpha/2, \quad (119)$$

donde ε_α es el eigenvalor de la ecuación de Schrödinger del sistema sin contactos $H_C \psi_{\alpha 0} = \varepsilon_{\alpha 0} \psi_{\alpha 0}$, Δ_α es el cambio en la energía –la parte real– debido a los contactos y $\frac{\gamma_0}{2}$ es la parte imaginaria del eigenvalor. La dependencia temporal asociada a cada estado tendrá la forma

$$\exp\left[\frac{-i\varepsilon_\alpha t}{\hbar}\right] \rightarrow \exp\left[\frac{-i(\varepsilon_{\alpha 0} - \Delta_\alpha)t}{\hbar}\right] \exp\left[\frac{-\gamma_\alpha t}{\hbar}\right]; \quad (120)$$

donde la parte imaginaria de la energía, γ_α , refleja la imposibilidad de imponer estado estacionario, o dicho de otro modo, el hecho de que cualquier electrón inyectado en el conductor eventualmente desaparecerá a través de alguno de los contactos. Tomando el módulo al cuadrado de la función de onda se obtiene la probabilidad:

$$|\psi_\alpha|^2 \exp\left[\frac{-2\gamma_\alpha t}{\hbar}\right], \quad (121)$$

que decae exponencialmente en el tiempo (no es estado estacionario) con un tiempo de vida medio dado por $\frac{\hbar}{2\gamma_\alpha}$. De esta manera, al abrir el sistema (conectarle los cables) los eigenestados del conductor se vuelven evanescentes en el tiempo.

Debido a que la obtención de las autoenergías no siempre puede realizarse de manera analítica, existen métodos computacionales para obtenerlas. A continuación describimos el método de decimación, un algoritmo muy eficiente para la obtención de las autoenergías y que ha sido probado ampliamente en el contexto del transporte en sistemas bidimensionales (Lewenkopf y Mucciolo, 2013).

2.5.2 Método de decimación

El método de decimación se basa en la teoría de la matrix de transferencia (Nardelli, 1999). Se elige este método porque permitirá implementar sistemas con contactos más generales como aquellos basados en grafeno o nanotubos de carbón. A continuación describimos este procedimiento.

Considere un sistema bidimensional compuesto solo por dos contactos, como se muestra en figura 11 proyectamos la ecuación 113 entre columnas y obtenemos

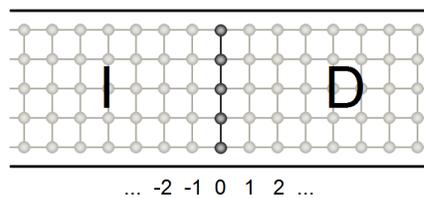


Figura 11. Diagrama para la obtención de las autoenergías.

$$\begin{aligned}
 (\epsilon - H_{00}) G_{00} &= I + H_{01} G_{10}, \\
 (\epsilon - H_{00}) G_{10} &= H_{01}^\dagger G_{00} + H_{01}, \\
 &\vdots \\
 (\epsilon - H_{00}) G_{n0} &= H_{01}^\dagger G_{n-10} + H_{01} G_{n+1,0},
 \end{aligned} \tag{122}$$

donde H_{nm} y G_{nm} son los elementos matriciales del hamiltoniano y la función de Green entre columnas, asumimos periodicidad tal que $H_{00} = H_{11} = \dots$ y $H_{01} = H_{12} = \dots$. Siguiendo a Sancho *et al.* (1984), podemos reescribir estas ecuaciones de tal forma que la función de Green de una columna se escriba en término de la función de Green de la siguiente (o anterior). Esto se hace a través de las matrices de transferencia T y \bar{T} , definidas de tal forma que $G_{01} = TG_{00}$ y $G_{00} = \bar{T}G_{10}$. La matriz de transferencia puede calcularse fácilmente de las ecuaciones 122

a través de un proceso iterativo, descrito por Sancho *et al.* (1984). En particular uno puede escribir T y \bar{T} como sigue,

$$\begin{aligned} T &= t_0 + \tilde{t}_0 t_1 + \tilde{t}_0 \tilde{t}_1 t_2 + \dots \tilde{t}_0 \tilde{t}_1 \tilde{t}_2 \dots t_n, \\ \bar{T} &= \tilde{t}_0 + t_0 \tilde{t}_1 + t_0 t_1 \tilde{t}_2 + \dots t_0 t_1 t_2 \dots \tilde{t}_n, \end{aligned} \quad (123)$$

donde t_i y \tilde{t}_i están definidas por las fórmulas de recursión,

$$\begin{aligned} t_i &= (I - t_{i-1} \tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1} t_{i-1})^{-1} t_{i-1}^2, \\ \tilde{t}_i &= (I - t_{i-1} \tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1} t_{i-1})^{-1} \tilde{t}_{i-1}^2, \end{aligned} \quad (124)$$

y

$$\begin{aligned} t_0 &= (\epsilon - H_{00})^{-1} H_{01} \\ \tilde{t}_0 &= (\epsilon - H_{00})^{-1} H_{01}. \end{aligned} \quad (125)$$

El proceso se repite hasta que $t_n, \tilde{t}_n \leq \delta$ con δ arbitrariamente pequeño (Sancho *et al.*, 1984). Usando este resultado podemos escribir la función de Green en la columna 0 de la siguiente forma,

$$G^0(\omega) = (\epsilon - H_{00} - H_{01} T - H_{01}^\dagger \bar{T})^{-1}. \quad (126)$$

Si comparamos esta expresión con la ecuación 113 identificamos que en este caso $H_{00} \equiv H_C$, $H_{01} \equiv h_{CD}$ y $H_{01}^\dagger \equiv h_{IC}^\dagger$. En particular,

$$\begin{aligned} \Sigma_I &= H_{01}^\dagger \bar{T}, \\ \Sigma_D &= H_{01} T. \end{aligned} \quad (127)$$

Estas expresiones nos permiten encontrar las autoenergías en un sistema con contactos sem-infinitos de estructura cristalina, no necesariamente de red cuadrada, por ejemplo el grafeno.

El término Σ puede verse como el hamiltoniano efectivo que surge de la interacción del conductor con los cables. Un término similar aparece en la función de Green debido a interacciones de electrones con fonones y con otros electrones (que por el momento estamos despreciando) y se le conoce como autoenergía. Por analogía, al término Σ se le llama autoenergía debido a los cables. Sin embargo, existen una diferencia fundamental: mientras las autoenergías debido a las interacciones electrón-electrón y electrón-fonón son una descripción aproximada del fenómeno, el término de autoenergía debido a los cables (Σ) toma en cuenta de manera exacta los efectos de los cables, pues en este desarrollo no se han hecho aproximaciones.

2.5.3 Cálculo de la función de Green en equilibrio: Método recursivo

El método de la función de Green recursiva (MFGR) fue propuesto originalmente por Thouless y Kirkpatrick (1981) y por Lee y Fisher (1981). Algunos años después, MacKinnon (1985)

presentó una formulación del método que es ampliamente utilizada hoy en día, y que es muy similar a la que se presenta en esta sección. Desde entonces, el MFGR ha sido ampliado y aplicado a varios sistemas. En particular se ha utilizado para el cálculo de la función de Green fuera de equilibrio incluyendo interacciones (Lake *et al.*, 1997; Lassl *et al.*, 2007).

Una vez conocidas las autoenergías, se puede encontrar la función de Green en equilibrio sustituyendo en la ecuación 113. Sin embargo, usualmente solo interesan algunos elementos de la función de Green, por ejemplo, para calcular la conductancia sólo se necesitan aquellos elementos de la función de Green que relacionan la primer columna de la región central $n = 1$ con la última $n = L$, es decir G_{1L} . El MFGR construye la función de Green agregando funciones de Green de secciones individuales de manera iterativa. Con este propósito, se divide el sistema en columnas. A continuación describimos esta técnica con más detalle.

Para hacer más fácil la exposición, ejemplificaremos con un sistema particular. Considere la estructura T presentada en Fig.12, una región central (más ancha) conectada a contactos. Cómo se describe en la sección anterior, se divide el sistema en tres secciones. Las regiones angostas son los contactos y se consideran a través de términos de autoenergías (véase sección anterior). La región ancha central la dividimos en columnas (como la mostrada en un rectángulo azul en 12), mismas que etiquetamos –de izquierda a derecha– como $1, 2, \dots, k-1, k, k+1, \dots, L$.

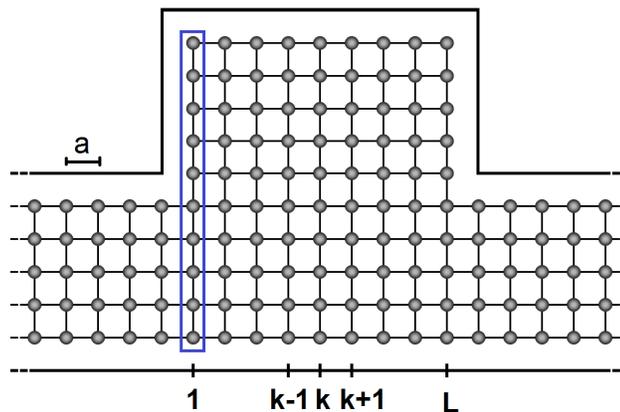


Figura 12. Esquema del dispositivo, una estructura T con una región central más ancha que los contactos.

En términos matemáticos, el MFGR se basa en que el hamiltoniano en aproximación de amarre fuerte de la región central puede descomponerse en una forma tridiagonal por bloques. Así, siguiendo un procedimiento como el descrito en la sección anterior se puede llegar a ecuaciones matriciales solubles. De manera alternativa, pero totalmente equivalente,

haremos una derivación basada en la ecuación de Dyson 49, que podemos escribir como,

$$G = G^0 + G^0 V G \quad (128)$$

donde G^0 es la función de Green del operador hamiltoniano sin perturbación H_0 , V es la perturbación, y G es la función de Green asociada al operador hamiltoniano perturbado $H = H_0 + V$. Se sabe que cuando la perturbación es solo la conexión entre regiones (sitios), la solución de la Ec.128 se puede realizar sin hacer aproximaciones (Datta, 1995).

La Fig. 13 muestra de manera esquemática los pasos del MFGR, que detallamos a continuación:

- (a) Primero se toma el hamiltoniano que describe la primera columna y se le agrega la conexión con el contacto izquierdo via términos de autoenergía. La función de Green asociada a esta primera columna, $G_{1,1}^0$, se calcula via inversión de matriz, de acuerdo a la Ec. 111.
- (b) Se calcula la función de Green asociada a la siguiente columna (desconectada del resto), $G_{2,2}^0$. En este paso, $G_{1,1}^0$ y $G_{2,2}^0$ forman parte de la función de Green antes de la perturbación, G^0 . La perturbación son los términos de tuneleo que conectan estas dos regiones, $V_{1,2}$ y $V_{2,1}$. Los elementos de la función de Green que son necesarios para, por ejemplo el cálculo de la conductancia, son: $G_{1,1}$, $G_{1,2}$, $G_{2,1}$ y $G_{2,2}$. Proyectando la ecuación de Dyson se obtiene,

$$\begin{aligned} G_{1,1} &= G_{1,1}^0 + G_{1,1}^0 V_{1,2} G_{2,1}, \\ G_{1,2} &= G_{1,1}^0 V_{1,2} G_{2,2}, \\ G_{2,1} &= G_{2,2}^0 V_{2,1} G_{1,1}, \\ G_{2,2} &= G_{2,2}^0 + G_{2,2}^0 V_{2,1} G_{1,2}. \end{aligned} \quad (129)$$

Este es un sistema soluble de cuatro ecuaciones con cuatro incógnitas. Después de resolver para las componentes de la función de Green, podemos repetir el proceso con la tercera columna, luego con la cuarta y así sucesivamente. En el k -ésimo paso la solución de las ecuaciones dan como resultado,

$$G_{k,k} = S_{k,k}^{k,k-1,k-1} G_{k,k}^0, \quad (130)$$

$$\begin{aligned} G_{1,k} &= G_{1,k-1}^0 V_{k-1,k} S_{k,k}^{k,k-1,k-1} G_{k,k}^0, \\ G_{l,k} &= G_{l,k-1}^0 V_{k-1,k} S_{k,k}^{k,k-1,k-1} G_{k,k}^0, \\ G_{l,l} &= S_{l,k-1}^{k-1,k,k} G_{l,l}^0. \end{aligned} \quad (131)$$

con $1 < l < k$ y donde se ha definido el propagador $S_{m,l}^{n,p,q} = [1 - G_{m,n}^0 V_{n,p} G_{p,q}^0 V_{q,l}]^{-1}$. Las primeras dos Ec. 130 se usan si solo se está interesado en calcular la conductancia, las otras dos Ec. 131 son también necesarias cuando se requieren los elementos diagonales de la función de Green, como para el cálculo de la densidad de estados.

- (c) Cuando se llega a la unión de la última columna, se debe considerar que esta columna está unida con los contactos y por tanto se le agregan los términos de autoenergía al hamiltoniano antes de la inversión. Luego se usa por última vez las ecuaciones recursivas 130 y 131, para agregar los efectos de esta última columna.
- (d) Al final de este procedimiento se obtienen los elementos de la función de Green que relacionan los sitios de la primera columna con la última, $G_{1,L}$, los cuales son necesarios para el cálculo de la transmisión o conductancia. Así mismo, se pueden obtener los términos diagonales $G_{l,l}$ de la función de Green, necesarios para la obtención de la densidad de estados.

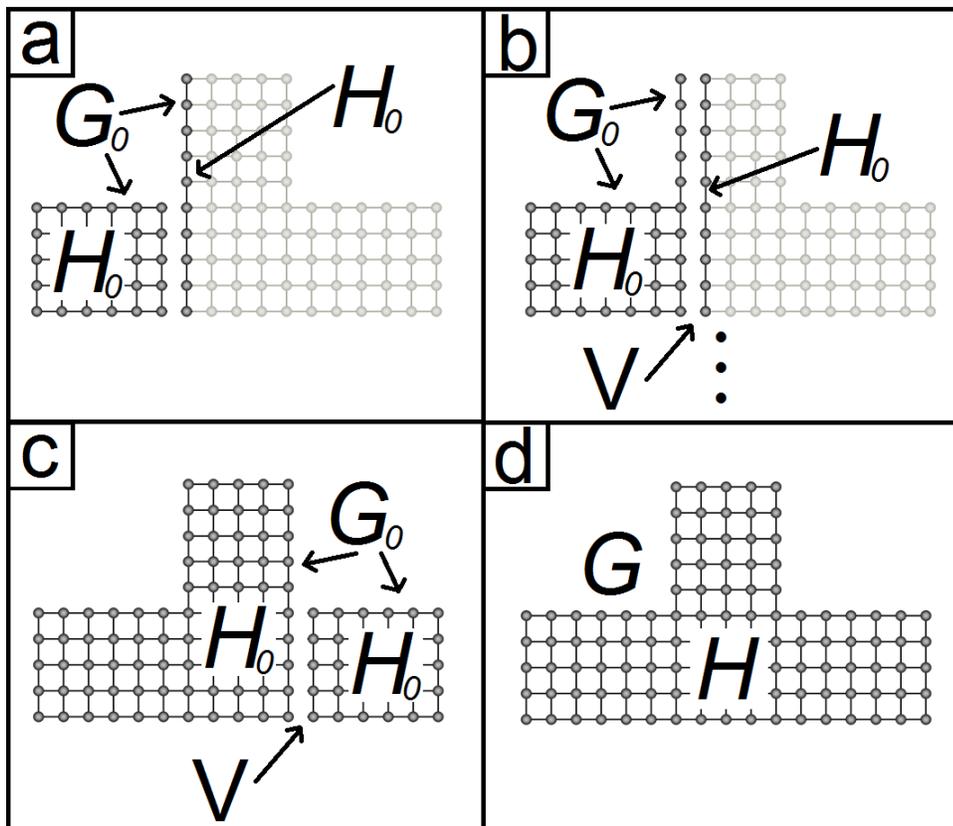


Figura 13. Esquema del método de la función de Green recursiva descrito en el texto. En el primer paso (a), se agregan los términos de autoenergía, después se conectan las otras columnas (b), hasta llegar a la última (c) y obtener la función de Green de todo el sistema (d).

2.5.4 Observables físicas en términos de la función de Green en equilibrio

Una vez que se tiene la función de Green dentro del conductor G^r , ésta se puede relacionar con la función de transmisión a través de la relación matricial de Fisher-Lee (Lee y Fisher, 1981) ,

$$\bar{T}_{pq} = \text{Tr} [\Gamma_p G^r \Gamma_q G^A], \quad (132)$$

donde Tr es la traza y los elemento de la matriz Γ_p están dados por,

$$\Gamma_p(i, j) = \sum_m \chi_m(p_i) \frac{\hbar v_m}{a} \chi(p_j) = i [\Sigma_p - \Sigma_p^\dagger]. \quad (133)$$

Esta relación se obtiene de manera directa a partir de la expresión 104 para los elementos de matriz y se introduce en las expresiones 90 y 91.

La función de Green también se puede relacionar con la densidad de estados $N(E)$ y con la densidad local de estados $\rho(\mathbf{r}, E)$:

$$N(E) = \frac{1}{2\pi} \text{Tr} [A(E)], \quad (134)$$

$$\rho(\mathbf{r}, E) = \frac{1}{2\pi} A(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [G^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)]. \quad (135)$$

De esta manera, la función de Green permite calcular a partir de un modelo teórico magnitudes medibles experimentalmente tales como: la densidad de estados, la densidad local de estados y por supuesto la conductancia.

El formalismo descrito en este capítulo se ha utilizado ampliamente y con mucho éxito por diversos autores, en una gran variedad de geometrías y estructuras tales como: puntos, anillos y alambres cuánticos, barras Hall, entre otros. Utilizando esta descripción se pueden estudiar fenómenos cuánticos de gran importancia, como lo son la cuantización de la conductancia -que se discutió en este texto- y el efecto Hall cuántico, además de efectos de interferencia como el Aharonov-Bohm (Villarreal *et al.*, 2011) y el Aharonov-Casher (Diago-Cisneros y Mireles, 2013). Una de las limitantes de este formalismo es que no incluye efectos de interacción de muchos cuerpos, sin embargo como mencionamos antes, ellos pueden incluirse de manera perturbativa (Haug y Jauho, 2007), que por ejemplo, puede servir para estudiar sistemas con correlaciones electrónicas tipo Hubbard (interacción electrón-electrón de corto alcance).

Capítulo 3

Método de renormalización para el transporte dependiente del tiempo

En este capítulo aplicaremos el formalismo de Keldysh (véase sección 2.3) para estudiar el transporte fuera de equilibrio de un sistema sujeto a potenciales dependientes del tiempo. Concretamente, estamos interesados en el cálculo de la corriente a través de un sistema cuántico como el de la figura 14: una región central conectada a dos contactos semi-infinitos. En las regiones de contacto se aplican potenciales cosenoidales de frecuencia Ω_0 y fase relativa δ . El método se puede utilizar en cualquier potencial periódico, sin embargo las expresiones se simplifican cuanto menos componentes tenga el potencial al desarrollarse en Fourier. Los potenciales se consideran aplicados solo en una columna de sitios, esto se puede generalizar a más columnas de manera directa, siempre y cuando el potencial sea localizado.

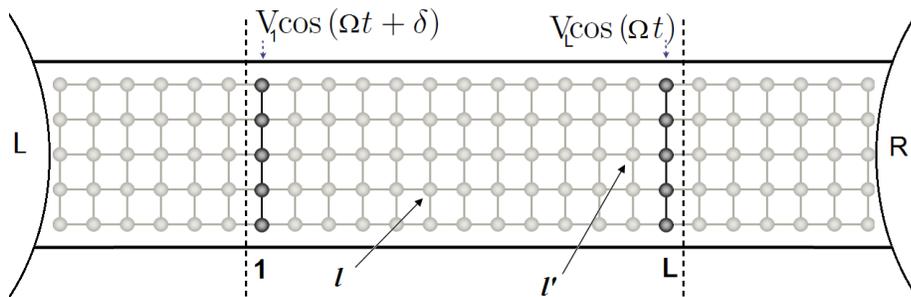


Figura 14. Esquema del dispositivo bidimensional. La región central está conectada a dos reservorios. En la región de contactos, se disponen potenciales cosenoidales en el tiempo aplicados que generan el bombeo de carga de un contacto a otro.

3.0.5 Detalles del modelo

Consideramos un sistema de muchos fermiones no interactuantes que se mueven en una región finita de N sitios dispuestos en una red cuadrada. El hamiltoniano en aproximación de amarre que describe la dinámica de este sistema es de la forma,

$$H^{sys}(t) = \sum_{l,l'=1}^N \left(H_{l,l'}^{sys}(t) c_l c_{l'}^\dagger + \text{H.C.} \right), \quad (136)$$

con elementos matriciales que contienen términos estacionarios y términos periódicos en el tiempo,

$$H_{l,l'}^{sys} = H_{l,l'}^0 + V_{l,l'}(t), \quad (137)$$

siendo $V_{l,l'}(t) = \sum_{k \neq 0} \exp(-ik\Omega_0 t) V_{l,l'}(k)$. Consideramos además, que tal sistema está conectado a M reservorios de electrones (en nuestro caso particular $M = 2$) a través de términos de contacto de la forma,

$$H^{con} = - \sum_{w=1}^M \omega_\alpha (c_{r_\alpha}^\dagger c_{j_\alpha} + H.c.), \quad (138)$$

donde γ_α es el parámetro de tuneleo entre los reservorios y el sistema central y r_α y j_α son coordenadas del sistema central y del reservorio, respectivamente (Arrachea, 2007).

Un formalismo adecuado para estudiar el transporte en un sistema como éste, es el de la función de Green fuera de equilibrio de Keldysh (Haug y Jauho, 2007). Dentro de este formalismo, se define la función de Green retardada entre los sitios (l, m) , dada por,

$$G_{l,m}^R(t, t') = -i\Theta(t - t') \langle \{c_l(t), c_m^\dagger(t')\} \rangle. \quad (139)$$

Ésta última se puede relacionar con la corriente que pasa a través del sistema central (Haug y Jauho, 2007), cantidad en la que estamos interesados para estudio del bombeo cuántico. De hecho, las componentes de Fourier de la función de Green retardada son las que se pueden relacionar con la corriente de bombeo. Más adelante se presenta ésta relación.

La evolución de la función de Green retardada (G^R) está gobernada por la ecuación de Dyson, misma que en su representación integral toma la forma,

$$\begin{aligned} G_{l,l'}^R(t, t') = & G_{l,l'}^0(t - t') + \sum_{\alpha=1}^M \int dt_1 dt_2 G_{l,j_\alpha}^R(t, t_1) \bar{\Sigma}_{j_\alpha}(t_1, t_2) G_{j_\alpha,l'}^0(t_2 - t') \\ & + \sum_{l_1, l_2}^M \int dt_1 G_{l,l_1}^R(t, t_1) V_{l_1, l_2}(t_1) G_{l_2, l'}^0(t_1 - t'), \end{aligned} \quad (140)$$

donde G^0 es la función de Green en equilibrio, asociada al hamiltoniano del sistema sin los términos con dependencia temporal; y $\bar{\Sigma}$ es la autoenergía asociada a los términos dependientes del tiempo en el hamiltoniano que describe a los contactos (en nuestro caso particular $\bar{\Sigma} = 0$). Nótese que la función de green para problemas dependientes del tiempo no tiene invariancia de traslación temporal. Como consecuencia depende de dos variables independientes, t y t' , las cuales pueden transformarse Fourier separadamente. Una de las transformadas de Fourier introduce la energía ω como variable conjugada de una de las variable temporales

(t) y la otra introduce la variable k como variable conjugada de la otra variable temporal t' . El significado de k es que determine los armónicos de la frecuencia de bombeo Ω_0 que afectan la energía de los modos propagantes.

Definimos la siguiente transformada de Fourier,

$$G_{l,l'}^R(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \exp(-i\omega[t - t']) G_{l,l'}^R(t, \omega), \quad (141)$$

$$G_{l,l'}^R(t, \omega) = \int_{-\infty}^t dt' \exp(-i[\omega + i0^+][t - t']) G_{l,l'}^R(t, t'). \quad (142)$$

Aplicamos ésta transformación a la ecuación 140 y obtenemos,

$$G^R(t, \omega) = G^0(\omega) + \sum_{k \geq 1} [\exp(-ik\Omega_0 t) G^R(t, \omega + k\Omega_0) V_k^- G^0(\omega) + \exp(ik\Omega_0 t) G^R(t, \omega + k\Omega_0) V_k^+ G^0(\omega)] \quad (143)$$

donde $G^R(t, \omega)$ [$G^0(\omega)$] denota una matrix de $N \times N$ con elementos $G_{l,l'}^R(t, \omega)$ [$G_{l,l'}^0(\omega)$]. Análogamente, $V_k^\pm(\omega) = V(\mp k) + \Sigma(\mp k, \omega)$, donde $V(k)$ y $\Sigma(k, \omega)$ son matrices con elementos $V_{l,l'}(k)$ y $\delta_{l,j_\alpha} \delta_{l',j_\alpha} \Sigma_{j_\alpha}(k, \omega)$; $\Sigma_{j_\alpha}(k, \omega)$ es la k -ésima ($k \neq 0$) componente de Fourier de la autoenergía asociada a los contactos (en nuestro caso particular son cero, pues suponemos contactos en equilibrio). La función de Green en equilibrio $G^0(\omega)$ es la solución a la siguiente ecuación de Dyson,

$$G^0(\omega) [\omega 1 - H^0 - \Sigma^0(\omega)] = 1, \quad (144)$$

donde las matrices Σ^0 y H^0 tienen elementos $\Sigma_{l,l'}^0(\omega) = \delta_{l,j_\alpha} \delta_{l',j_\alpha} \Sigma_{j_\alpha}(0, \omega)$ y $H_{l,l'}^0$ respectivamente.

La ecuación 143 es la relación central para el procedimiento de renormalización. Esta relación acopla la función de Green retardada, a una frecuencia (o energía) ω dada, con la misma función de Green retardada a frecuencias $\omega + k\Omega_0$. La relación 143 representa un número infinito de ecuaciones acopladas.

Debido a la estructura periódica del conjunto de ecuaciones 143, la función de Green retardada en el tiempo es también una función periodica en t , de esta manera puede desarrollarse como una serie Fourier

$$G^R(t, \omega) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \mathcal{G}(k, \omega) \exp(-ik\Omega_0 t), \quad (145)$$

$$\mathcal{G}(k, \omega) = \frac{1}{\tau_0} \int_0^{\tau_0} dt \exp(ik\Omega_0 t) G^R(t, \omega). \quad (146)$$

Es posible aplicar la descomposición en Fourier a la función de Green retardada 145 para escribir las observables de interés en el sistema, por ejemplo, la corriente que pasa a través del dispositivo.

3.0.6 Procedimiento de renormalización para un armónico

El caso de un solo armónico corresponde a $V_k^\pm(\omega) = 0, \forall k \geq 2$. Un ejemplo de esta situación es un potencial cosenoidal en el tiempo. El objetivo es encontrar las componentes de Fourier $\mathcal{G}(k, \omega)$ de la función de Green retardada a una ω dada. El procedimiento a seguir fue desarrollado por Arrachea (2007) y se basa en definir un valor de corte $k_{\text{corte}} = \mathcal{K}$, que determina el número de frecuencias de acoplamiento o bien, el valor del máximo armónico que puede afectar el transporte (la máxima diferencia de energía entre las subbandas), $\omega - \mathcal{K}\Omega_0, \dots, \omega, \dots, \omega + \mathcal{K}\Omega_0$ y, entonces, el número total de ecuaciones acopladas en el conjunto 143. La razón física de proponer una frecuencia de corte es que la potencia que puede desarrollar la fuente del campo oscilante real es finita. El conjunto finito de ecuaciones resultante se puede desacoplar con un procedimiento de renormalización Arrachea (2007) y obtener el siguiente resultado:

$$G_R(t, \omega) = \sum_{k=\mathcal{K}}^{\mathcal{K}} \mathcal{G}(k, \omega) \exp(-ik\Omega_0 t), \quad (147)$$

siendo

$$\begin{cases} \mathcal{G}(0, \omega) = \left\{ [G^0(\omega)]^{-1} - V_1^+ g_{+1}(\omega + \Omega_0) V_1^- - V_1^- g_{-1}(\omega - \Omega_0) V_1^+ \right\}^{-1}, \\ \mathcal{G}(n, \omega) = g_n(\omega + n\Omega_0) V_1^- \mathcal{G}(n-1, \omega) & n > 0, \\ \mathcal{G}(n, \omega) = g_{(-|n|)}(\omega + n\Omega_0) V_1^+ \mathcal{G}(n+1, \omega) & n < 0, \end{cases} \quad (148)$$

con

$$g_{\pm m}(\omega \pm m\Omega_0) = \left\{ [G^0(\omega \pm m\Omega_0)]^{-1} - V_1^{+\pm} g_{\pm(m+1)}(\omega \pm (m+1)\Omega_0) V_1^\mp \right\}^{-1}, \quad (149)$$

donde

$$g_{\pm\mathcal{K}}(\omega + \mathcal{K}\Omega_0) \equiv G^0(\omega \pm \mathcal{K}\Omega_0). \quad (150)$$

Los conjuntos de ecuaciones 148, 149 y 150 permiten calcular la función de Green retardada para cualquier ω :

1. Dado un ω se obtiene $g_{\pm\mathcal{K}}(\omega + \mathcal{K}\Omega_0)$ a través de la ecuación 150 solucionando una ecuación de la forma 144;

2. después por recursión, se obtienen todas la $g_{\pm m}$'s con $-\mathcal{K} \leq m \leq \mathcal{K}$ sustituyendo en la ecuación 149;
3. por último, las componentes de Fourier $\mathcal{G}(k, \omega)$ se obtienen del conjunto de ecuaciones 148.

3.0.7 Corriente de bombeo

Una vez conocidas las componentes de Fourier de la función de Green retardada se obtiene la corriente inducida en función de ellas, la cual se puede escribir (Arrachea, 2004),

$$J_{dc,\alpha} = \frac{e}{\hbar} \sum_{\beta=1,L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} \{ \Gamma_{\alpha}(\omega + n\Omega_0) \mathcal{G}(n, \omega) \Gamma_{\beta}(\omega) \mathcal{G}^{\dagger}(n, \omega) \} \quad (151)$$

$$\times [f_{\beta}(\hbar\omega) - f_{\alpha}(\hbar\omega + n\hbar\Omega_0)],$$

donde 1 y L son las etiquetas para los sitios de contacto, α representa el contacto donde se mide la corriente, la matriz de hibridización Γ está dada por $\Gamma = -2\text{Im}\Sigma$ y f es la función de distribución Fermi-Dirac.

Las implementaciones que se han realizado de este método de renormalización para el cálculo de corriente, por ejemplo Arrachea (2007), implican la inversión de matrices de $N^2 \times N^2$, donde N es el número total de sitios de la región central. Por ésta razón los tiempos de computo son muy elevados y los sistemas tratables con esta implementación (tal como está) son de tamaño reducido. El desarrollo de un procedimiento de optimización similar al método recursivo de la función Green, común para sistemas en equilibrio y donde se calculan solo los elementos de la función de Green necesarios, es de interés en este caso fuera de equilibrio. Hasta el momento no se ha reportado en la literatura una implementación con estas características.

3.0.8 Método de evaluación

El método descrito a continuación es una manera de implementar el formalismo recursivo al cálculo de la función de Green fuera de equilibrio en presencia de perturbaciones dependientes del tiempo. Este método es uno de los resultados importantes de mi trabajo de tesis, por esta razón lo describimos en detalle.

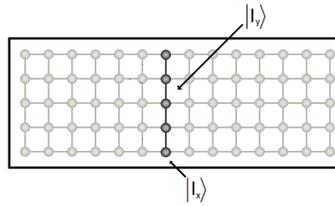


Figura 15. Esquema para la representación de sitios por coordenadas

Cambio de notación

Cambiamos la notación en la base de sitio

$$|l\rangle = |l_x\rangle \otimes |l_y\rangle = |l_x l_y\rangle, \quad (152)$$

donde $|l_x\rangle$ es un elemento de la base de Wannier para el grado de libertad longitudinal y $|l_y\rangle$ es un elemento de la base de Wannier para el grado de libertad transversal: De ésta manera, el índice l_x corre desde 1 hasta L , donde 1 representa la posición de la primera columna de sitios, es decir, la que está conectada con el reservorio de la izquierda y L representa la última columna de sitios –conectada con el reservorio de la derecha. Sea N_{l_x} el número de elementos en la columna l_x , entonces la etiqueta l_y corre de 1 a N_{l_x} , es decir depende del número de sitios por columna.

Considere un operador \mathbf{A} en esta base de sitio, los elementos de matriz de este operador los denotamos de la siguiente manera,

$$\langle l_x l_y | \mathbf{A} | l'_x l'_y \rangle = \mathbf{A}_{l_y l'_y}^{l_x l'_x}, \quad (153)$$

donde l_x denota la etiqueta para una columna, al igual que l'_x . Podemos agrupar los elementos de matriz que relacionan la columna l_x con la columna l'_x en una matriz $\mathbf{A}^{l_x l'_x}$, con elementos dados por,

$$\left\{ \mathbf{A}^{l_x l'_x} \right\}_{ij} = \langle l_x i | \mathbf{A} | l'_x j \rangle, \quad (154)$$

donde el rango de esta matriz es igual al número de sitios en la más extensa de las columnas $\{N_{l_x} \text{ ó } N_{l'_x}\}$.

Desarrollo para la fórmula para la corriente

Se sabe que la matriz de hibridización $\Gamma_\alpha = -2\text{Im}\Sigma_\alpha$, por lo tanto

$$\langle l_x l_y | \Gamma_\alpha | l'_x l'_y \rangle = \delta_{l_x, \alpha} \delta_{l'_x, \alpha} \Gamma_{l_y, l'_y}^\alpha. \quad (155)$$

Utilizando este hecho y la expresión para el operador identidad $\mathbf{I} = \sum_{j_x, j_y} |j_x j_y\rangle \langle j_x, j_y|$, desarrollamos la traza en la ecuación 151 como sigue,

$$\begin{aligned} \text{Tr} \{ \Gamma_\alpha \mathcal{G} \Gamma_\beta \mathcal{G}^\dagger \} &= \text{Tr} \{ \Gamma_\alpha (\omega + n\Omega_0) \mathcal{G} (n, \omega) \Gamma_\beta (\omega) \mathcal{G}^\dagger (n, \omega) \} \\ &= \sum_{l_x, l_y} \langle l_x l_y | \Gamma^\alpha (\omega + n\Omega_0) \sum_{j_x, j_y} |j_x j_y\rangle \langle j_x, j_y| \mathcal{G} (n, \omega) \\ &\quad \times \sum_{j'_x, j'_y} |j'_x, j'_y\rangle \langle j'_x, j'_y| \Gamma^\beta (\omega) \sum_{j''_x, j''_y} |j''_x, j''_y\rangle \langle j''_x, j''_y| \mathcal{G}^\dagger (n, \omega) |l_x l_y\rangle. \end{aligned}$$

Así,

$$\begin{aligned} \text{Tr} \{ \Gamma_\alpha \mathcal{G} \Gamma_\beta \mathcal{G}^\dagger \} &= \sum_{l_x \dots} \delta_{l_x, \alpha} \delta_{j_x, \alpha} \Gamma_{l_y, j_y}^\alpha (\omega + n\Omega_0) \mathcal{G}_{j_y, j'_y}^{j_x, j'_x} (n, \omega) \\ &\quad \times \delta_{j'_x, \beta} \delta_{j''_x, \beta} \Gamma_{j'_y, j''_y}^\beta (\omega) \mathcal{G}_{j'_y, l_y}^{\dagger j''_x, l_x} (n, \omega) \\ &= \sum_{l_x \dots} \Gamma_{l_y, j_y}^\alpha (\omega + n\Omega_0) \mathcal{G}_{j_y, j'_y}^{\alpha, \beta} (n, \omega) \Gamma_{j'_y, j''_y}^\beta (\omega) \mathcal{G}_{j''_y, l_y}^{\dagger \beta, \alpha} (n, \omega), \end{aligned}$$

o en forma matricial,

$$\text{Tr} \{ \Gamma_\alpha \mathcal{G} \Gamma_\beta \mathcal{G}^\dagger \} = \text{Tr} \left\{ \Gamma^\alpha (\omega + n\Omega_0) \mathcal{G}^{\alpha, \beta} (n, \omega) \Gamma^\beta (\omega) \mathcal{G}^{\dagger \beta, \alpha} (n, \omega) \right\}, \quad (156)$$

donde, por ejemplo, $\mathcal{G}^{\alpha, \beta} (n, \omega)$ es la matriz con elementos $\mathcal{G}_{j_y, j'_y}^{\alpha, \beta} (n, \omega)$ que relaciona la columna α con la columna β ; y los índices $\alpha, \beta = \{1, L\}$, denotan los contactos. De esta manera, los elementos de la función de Green necesarios para calcular la corriente de bombeo son aquellos que relacionan los sitios en las columnas 1 y L , es decir las matrices \mathcal{G}^{11} , \mathcal{G}^{1L} , \mathcal{G}^{L1} y \mathcal{G}^{LL} . Para obtener estas matrices es necesario evaluar las expresiones en las ecuaciones 148, 149, 150. Como hemos dicho, evaluarlas numéricamente –tal como están– implicaría invertir matrices de $N^2 \times N^2$. Requerimos escribir estas ecuaciones de tal forma que solo calculemos los elementos de las \mathcal{G} 's que nos interesan, es decir aquellos elementos que forman las matrices \mathcal{G}^{11} , \mathcal{G}^{1L} , \mathcal{G}^{L1} y \mathcal{G}^{LL} . El primer paso para reescribir estas ecuaciones es escribir encontrar una expresión para el potencial $V(t)$ en nuestra representación de sitio.

Desarrollo del potencial

Teníamos que $V_{l, l'}(t) = \sum_{k \neq 0} \exp(-ik\Omega_0 t) V_{l, l'}(k)$. Con δ la fase relativa entre los potenciales en los reservorios. En nuestro caso hay dos potenciales periódicos con desfase relativo,

localizados en la columna 1 y la columna L . En nuestra representación,

$$\begin{aligned}
V(t) &= \sum_{l_y}^{N_1} |1l_y\rangle V \cos(\Omega_0 t + \delta) \langle 1l_y| + \sum_{l_y}^{N_L} |Ll_y\rangle V \cos(\Omega_0 t) \langle Ll_y| \\
&= \sum_{l_y}^N \left[|1l_y\rangle V \left(\frac{\exp(i\Omega_0 t + i\delta) + \exp(-i\Omega_0 t - i\delta)}{2} \right) \langle 1l_y| \right] \\
&\quad + \sum_{l_y}^N \left[|Ll_y\rangle V \left(\frac{\exp(i\Omega_0 t) + \exp(-i\Omega_0 t)}{2} \right) \langle Ll_y| \right] \\
&= \sum_{l_y}^N \left\{ \exp(i\Omega_0 t) \frac{1}{2} [|1l_y\rangle V \exp(i\delta) \langle 1l_y| + |Ll_y\rangle V \langle Ll_y|] \right. \\
&\quad \left. + \exp(-i\Omega_0 t) \frac{1}{2} [|1l_y\rangle V \exp(-i\delta) \langle 1l_y| + |Ll_y\rangle V \langle Ll_y|] \right\} \\
V(t) &= \sum_{n \neq 0} \exp(-in\Omega_0 t) V(n), \tag{157}
\end{aligned}$$

con V una constante y N el mayor entre $\{N_1, N_L\}$, por lo tanto

$$\begin{aligned}
V(+1) &= \sum_{l_y}^N \frac{1}{2} [|1l_y\rangle V \exp(-i\delta) \langle 1l_y| + |Ll_y\rangle V \langle Ll_y|] \\
V(-1) &= \sum_{l_y}^N \frac{1}{2} [|1l_y\rangle V \exp(i\delta) \langle 1l_y| + |Ll_y\rangle V \langle Ll_y|], \tag{158}
\end{aligned}$$

siguiendo la notación de Arrachea (2007), hacemos $V_1^\pm = V(\mp 1)$, en general $V_k^\pm(\omega) = V(\mp k)$. Definimos los operadores (o matrices), $V^{11} = \sum_{l_y}^N |1l_y\rangle V \langle 1l_y|$, y $V^{LL} = \sum_{l_y}^N |Ll_y\rangle V \langle Ll_y|$, que son diagonales en l_y y entonces,

$$\begin{aligned}
V_1^+ &= \frac{1}{2} [V^{11} \exp(i\delta) + V^{LL}], \\
V_1^- &= \frac{1}{2} [V^{11} \exp(-i\delta) + V^{LL}]. \tag{159}
\end{aligned}$$

Evaluación de las componentes de Fourier de la función de Green

Tomamos la primera ecuación del conjunto 148 y la reescribimos como sigue

$$\mathcal{G}(0, \omega) = \frac{1}{[G_0(\omega)]^{-1} - V_1^+ g_{+1}(\omega + \Omega_0) V_1^- - V_1^- g_{-1}(\omega - \Omega_0) V_1^+}, \tag{160}$$

sabemos que

$$[G_0(\omega)]^{-1} = \mathbf{1}\omega - H_0 - \Sigma_0, \tag{161}$$

donde Σ_0 tiene información de la conexión con los contactos. Hacemos,

$$\Sigma(\omega, \Omega_0) = +V_1^+ g_{+1}(\omega + \Omega_0) V_1^- + V_1^- g_{-1}(\omega - \Omega_0) V_1^+, \quad (162)$$

entonces

$$\mathcal{G}(0, \omega) = \frac{1}{[G_0(\omega)]^{-1} - \Sigma(\omega, \Omega_0)}, \quad (163)$$

por lo tanto (utilizando Dyson),

$$\mathcal{G}(0, \omega) = G_0(\omega) + G_0(\omega) \Sigma(\omega, \Omega_0) \mathcal{G}(0, \omega). \quad (164)$$

De esta última relación podemos obtener las componentes de Fourier deseadas, a saber \mathcal{G}^{11} , \mathcal{G}^{1L} , \mathcal{G}^{L1} , \mathcal{G}^{LL} . Primero desarrollamos la expresión para Σ ,

$$\begin{aligned} \Sigma &= \frac{1}{2} [V^{11} \exp(+i\delta) + V^{LL}] g_{+1}(\omega + \Omega_0) \frac{1}{2} [V^{11} \exp(-i\delta) + V^{LL}] \\ &\quad + \frac{1}{2} [V^{11} \exp(-i\delta) + V^{LL}] g_{-1}(\omega - \Omega_0) \frac{1}{2} [V^{11} \exp(+i\delta) + V^{LL}] \\ \Sigma &= \frac{1}{4} [V^{11} \exp(+i\delta) g_{+1}^{11}(\omega + \Omega_0) V^{11} \exp(-i\delta) + V^{11} \exp(+i\delta) g_{+1}^{1L}(\omega + \Omega_0) V^{LL} \\ &\quad + V^{LL} g_{+1}^{L1}(\omega + \Omega_0) V^{11} \exp(-i\delta) + V^{LL} g_{+1}^{LL}(\omega + \Omega_0) V^{LL} \\ &\quad + V^{11} \exp(-i\delta) g_{-1}^{11}(\omega - \Omega_0) V^{11} \exp(+i\delta) + V^{11} \exp(-i\delta) g_{-1}^{1L}(\omega - \Omega_0) V^{LL} \\ &\quad + V^{LL} g_{-1}^{L1}(\omega - \Omega_0) V^{11} \exp(+i\delta) + V^{LL} g_{-1}^{LL}(\omega - \Omega_0) V^{LL}], \end{aligned}$$

para facilitar la notación, escribimos $g_{+1}^{11}(\omega + \Omega_0) = g_{+1}^{11}$ y $g_{-1}^{L1}(\omega - \Omega_0) = g_{-1}^{L1}$, así, y definimos las componentes de la autoenergía, como sigue,

$$\begin{aligned} \Sigma^{11} &= \frac{1}{4} V^{11} (g_{+1}^{11} + g_{-1}^{11}) V^{11}, \\ \Sigma^{1L} &= \frac{1}{4} V^{11} (g_{+1}^{1L} \exp(+i\delta) + g_{-1}^{1L} \exp(-i\delta)) V^{LL}, \\ \Sigma^{L1} &= \frac{1}{4} V^{LL} (g_{+1}^{L1} \exp(-i\delta) + g_{-1}^{L1} \exp(+i\delta)) V^{11}, \\ \Sigma^{LL} &= \frac{1}{4} V^{LL} (g_{+1}^{LL} + g_{-1}^{LL}) V^{LL}. \end{aligned} \quad (165)$$

Posteriormente, sustituimos esta ecuación en la relación -tipo Dyson- de la ecuación 164 y obtenemos

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{11} &= G_0^{11} + G_0^{11} \Sigma^{11} \mathcal{G}^{11} + G_0^{11} \Sigma^{1L} \mathcal{G}^{L1} + G_0^{1L} \Sigma^{L1} \mathcal{G}^{11} + G_0^{1L} \Sigma^{LL} \mathcal{G}^{L1}, \\ \mathcal{G}^{L1} &= G_0^{L1} + G_0^{L1} \Sigma^{11} \mathcal{G}^{11} + G_0^{L1} \Sigma^{1L} \mathcal{G}^{L1} + G_0^{LL} \Sigma^{L1} \mathcal{G}^{11} + G_0^{LL} \Sigma^{LL} \mathcal{G}^{L1}, \end{aligned}$$

factorizamos y obtenemos,

$$\begin{aligned} [1 - G_0^{11} \Sigma^{11} - G_0^{1L} \Sigma^{LL}] \mathcal{G}^{11} &= G_0^{11} + [G_0^{11} \Sigma^{1L} + G_0^{1L} \Sigma^{LL}] \mathcal{G}^{L1}, \\ [1 - G_0^{L1} \Sigma^{1L} - G_0^{LL} \Sigma^{LL}] \mathcal{G}^{L1} &= G_0^{L1} + [G_0^{L1} \Sigma^{11} + G_0^{LL} \Sigma^{L1}] \mathcal{G}^{11}. \end{aligned}$$

Definimos las siguientes expresiones,

$$\begin{aligned}
A &= 1 - G_0^{11}\Sigma^{11} - G_0^{1L}\Sigma^{L1} \\
B &= G_0^{11}\Sigma^{1L} + G_0^{1L}\Sigma^{LL} \\
C &= 1 - G_0^{L1}\Sigma^{1L} - G_0^{LL}\Sigma^{LL} \\
D &= [G_0^{L1}\Sigma^{11} + G_0^{LL}\Sigma^{L1}]
\end{aligned} \tag{166}$$

entonces

$$\mathcal{G}^{11} = [A - BC^{-1}D]^{-1} [G_0^{11} + BC^{-1}G_0^{L1}], \tag{167}$$

y

$$\mathcal{G}_{L1} = C^{-1}G_0^{L1} + C^{-1}D\mathcal{G}^{11}. \tag{168}$$

De esta manera podemos obtener \mathcal{G}^{11} y \mathcal{G}^{L1} . Con un procedimiento similar, a partir de la ecuación 164 podemos encontrar el otro par de ecuaciones,

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}^{LL} &= G_0^{LL} + G_0^{L1}\Sigma^{11}\mathcal{G}^{1L} + G_0^{L1}\Sigma^{1L}\mathcal{G}^{LL} + G_0^{LL}\Sigma^{L1}\mathcal{G}^{1L} + G_0^{LL}\Sigma^{LL}\mathcal{G}^{LL} \\
\mathcal{G}^{1L} &= G_0^{1L} + G_0^{11}\Sigma^{11}\mathcal{G}^{1L} + G_0^{11}\Sigma^{1L}\mathcal{G}^{LL} + G_0^{1L}\Sigma^{L1}\mathcal{G}^{1L} + G_0^{1L}\Sigma^{LL}\mathcal{G}^{LL}
\end{aligned} \tag{169}$$

y solucionarlo para encontrar

$$\mathcal{G}^{1L} = [A - BC^{-1}D]^{-1} [G_0^{1L} + BC^{-1}G_0^{LL}] \tag{170}$$

y

$$\mathcal{G}_{LL} = C^{-1}G_0^{LL} + C^{-1}D\mathcal{G}^{1L}. \tag{171}$$

Con los resultados de las ecuaciones 167, 168, 170 y 171, fácilmente podemos encontrar expresiones para las componentes de Fourier de orden superior de la función de Green que relacionan los sitios en los extremos de la región central del dispositivo. Para continuar, partimos de la segunda ecuación del conjunto 148 y con un procedimiento similar obtenemos,

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}^{11}(n, \omega) &= \frac{1}{2} [g_n^{11}V^{11}\mathcal{G}_{n-1}^{11} \exp(-i\delta) + g_n^{1L}V^{LL}\mathcal{G}_{n-1}^{L1}], \\
\mathcal{G}^{L1}(n, \omega) &= \frac{1}{2} [g_n^{L1}V^{11}\mathcal{G}_{n-1}^{11} \exp(-i\delta) + g_n^{LL}V^{LL}\mathcal{G}_{n-1}^{L1}], \\
\mathcal{G}^{1L}(n, \omega) &= \frac{1}{2} [g_n^{11}V^{11}\mathcal{G}_{n-1}^{1L} \exp(-i\delta) + g_n^{1L}V^{LL}\mathcal{G}_{n-1}^{LL}], \\
\mathcal{G}^{LL}(n, \omega) &= \frac{1}{2} [g_n^{L1}V^{11}\mathcal{G}_{n-1}^{L1} \exp(-i\delta) + g_n^{LL}V^{LL}\mathcal{G}_{n-1}^{LL}].
\end{aligned} \tag{172}$$

y de la tercera obtenemos,

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}^{11}(n, \omega) &= \frac{1}{2} [g_{-|n|}^{11} V^{11} \mathcal{G}_{n-1}^{11} \exp(i\delta) + g_{-|n|}^{1L} V^{LL} \mathcal{G}_{n-1}^{L1}] \\
\mathcal{G}^{L1}(n, \omega) &= \frac{1}{2} [g_{-|n|}^{L1} V^{11} \mathcal{G}_{n-1}^{11} \exp(i\delta) + g_{-|n|}^{LL} V^{LL} \mathcal{G}_{n-1}^{L1}] \\
\mathcal{G}^{1L}(n, \omega) &= \frac{1}{2} [g_{-|n|}^{11} V^{11} \mathcal{G}_{n-1}^{1L} \exp(i\delta) + g_{-|n|}^{1L} V^{LL} \mathcal{G}_{n-1}^{LL}] \quad n < 0. \\
\mathcal{G}^{LL}(n, \omega) &= \frac{1}{2} [g_{-|n|}^{L1} V^{11} \mathcal{G}_{n-1}^{LL} \exp(i\delta) + g_{-|n|}^{LL} V^{LL} \mathcal{G}_{n-1}^{LL}]
\end{aligned} \tag{173}$$

De esta manera, con las ecuaciones 167, 168, 170, 171, 172 y 173, podemos calcular todas las componentes de Fourier. Sin embargo, éstas dependen de los términos g_n^{11} , g_n^{1L} , g_n^{L1} y g_n^{LL} con $-\kappa \leq n \leq \kappa$. Para obtener las g 's reescribimos la ecuación 149 como sigue,

$$g_{\pm m}(\omega \pm m\Omega_0) = \frac{1}{[G_0(\omega \pm m\Omega_0)]^{-1} - V_1^\pm g_{\pm(m+1)}(\omega \pm (m+1)\Omega_0) V_1^\mp} \tag{174}$$

con $m \geq 0$, denotamos $g_{\pm m}(\omega \pm m\Omega_0)$ como $g_{\pm m}$ y $G_0(\omega \pm m\Omega_0)$ como G_0^m . Además definimos,

$$\Sigma_\pm = V_1^\pm g_{\pm(m+1)}(\omega \pm (m+1)\Omega_0) V_1^\mp. \tag{175}$$

posteriormente, tomamos este término de autoenergía Σ_\pm y lo descomponemos de la siguiente manera,

$$\begin{aligned}
\Sigma_\pm &= \frac{1}{4} [V^{11} \exp(\pm i\delta) + V^{LL}] g_{\pm(m+1)} [V^{11} \exp(\mp i\delta) + V^{LL}] \\
&= \frac{1}{4} [V^{11} g_{\pm(m+1)}^{11} V^{11} + V^{11} g_{\pm(m+1)}^{1L} \exp(\pm i\delta) V^{LL} \\
&\quad + V^{LL} g_{\pm(m+1)}^{LL} V^{LL} + V^{LL} g_{\pm(m+1)}^{L1} \exp(\mp i\delta) V^{11}],
\end{aligned}$$

así

$$\begin{aligned}
\Sigma_\pm^{11} &= \frac{1}{4} V^{11} g_{\pm(m+1)}^{11} V^{11} \\
\Sigma_\pm^{1L} &= \frac{1}{4} V^{11} g_{\pm(m+1)}^{1L} \exp(\pm i\delta) V^{LL} \\
\Sigma_\pm^{L1} &= \frac{1}{4} V^{LL} g_{\pm(m+1)}^{L1} \exp(\mp i\delta) V^{11} \\
\Sigma_\pm^{LL} &= \frac{1}{4} V^{LL} g_{\pm(m+1)}^{LL} V^{LL}.
\end{aligned} \tag{176}$$

$$\tag{177}$$

Usando Dyson podemos reescribir la ecuación 174 como sigue

$$g_{\pm m} = G_m^0 + G_m^0 \Sigma_{\pm} g_{\pm m}. \quad (178)$$

Esta ecuación tiene la misma estructura que la ecuación 164 y por tanto una solución similar, sólo es necesario reemplazar,

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(0, \omega) &\rightarrow g_{\pm m}, \\ G^0(\omega) &\rightarrow G_m^0, \\ \Sigma &\rightarrow \Sigma_{\pm}, \end{aligned} \quad (179)$$

y entonces la nueva definición de las matrices A , B , C , D será,

$$\begin{aligned} A &= 1 - G_0^{m11} \Sigma_{\pm}^{11} - G_0^{m1L} \Sigma_{\pm}^{L1}, \\ B &= G_0^{m11} \Sigma_{\pm}^{1L} + G_0^{m1L} \Sigma_{\pm}^{LL}, \\ C &= 1 - G_0^{mL1} \Sigma_{\pm}^{1L} - G_0^{mLL} \Sigma_{\pm}^{LL}, \\ D &= [G_0^{mL1} \Sigma_{\pm}^{11} + G_0^{mLL} \Sigma_{\pm}^{L1}], \end{aligned} \quad (180)$$

y las soluciones,

$$g_{\pm m}^{11} = [A - BC^{-1}D]^{-1} [G_0^{m11} + BC^{-1}G_0^{mL1}] \quad (181)$$

$$g_{\pm m}^{L1} = C^{-1}G_0^{mL1} + C^{-1}Dg_{\pm m}^{11}. \quad (182)$$

$$g_{\pm m}^{1L} = [A - BC^{-1}D]^{-1} [G_0^{m1L} + BC^{-1}G_0^{mLL}] \quad (183)$$

$$g_{\pm m}^{LL} = C^{-1}G_0^{mLL} + C^{-1}Dg_{\pm m}^{1L}. \quad (184)$$

Para implementar este método se requiere primero encontrar las $g_{\pm m}$'s para una energía dada, a través de las ecuaciones 181, 182, 183, 184. Después sustituir las $g_{\pm m}$'s en las definiciones de las Σ 's de la ecuación 165 y encontrar los elementos de la componente de Fourier cero de la función de Green con las ecuaciones 167, 168, 170, 171. Una vez que se conoce la componente cero de Fourier y las $g_{\pm m}$'s podemos encontrar la otras componentes a través de las ecuaciones 172 y 173.

Este método de evaluación lo aplicamos para estudiar la corriente de bombeo a través de cintas de grafeno. En el siguiente capítulo presentamos las características electrónicas fundamentales de este material.

Capítulo 4

El grafeno

El carbono es la materia prima para la vida y la base para toda la química orgánica. Debido a la flexibilidad de sus enlaces, los sistemas basados en carbono muestran un ilimitado número de diferentes estructuras. El grafeno es una alótropo del carbono, consiste en una red hexagonal bidimensional y puede ser pensado como compuesto de anillos de benceno a los que se les ha retirado los hidrógenos. La flexibilidad estructural del grafeno se refleja en sus propiedades electrónicas. La hibridización sp^2 , entre un orbital s y dos orbitales p , dan lugar a una estructura trigonal planar con la formación de un enlace σ entre átomos de carbono que están separados por 1.42 \AA (Castro Neto *et al.*, 2009).

Wallace (1947) fue el primero en reportar la estructura de bandas del grafeno. El mostró el comportamiento semimetálico inusual de este material. En ese momento, la idea de un material puramente bidimensional estaba fuera de la realidad, la motivación de los estudios de Wallace era dar un punto de partida para el entendimiento del movimiento de electrones en grafito. Tuvieron que pasar varias décadas para que Novoselov *et al.* (2004) sintetizaran exitosamente el grafeno, obteniendo el premio Nobel en 2010 por tal hazaña.

Uno de los aspectos más interesantes del grafeno es que sus excitaciones de más baja energía son fermiones de Dirac sin masa. En grafeno neutral, el potencial químico cruza exactamente en el punto de Dirac. Esta dispersión particular, que solo es válida para bajas energías, asemeja la física de estas partículas a la de la electrodinámica cuántica (QED, por sus siglas en Inglés) para fermiones sin masa, excepto que en grafeno los fermiones de Dirac se mueven con velocidad v_F , que es 300 veces menos que la velocidad de la luz c . Así, muchas propiedades inusuales de la QED pueden mostrarse en grafeno a bajas energías y velocidades. En particular, los fermiones en grafeno exhiben la llamada paradoja de Klein, que se refiere al hecho de que fermiones de Dirac pueden ser transmitidos con probabilidad 1 a través de regiones prohibidas clásicamente Castro Neto *et al.* (2009). De hecho, bajo ciertas condiciones, los fermiones de Dirac son inmunes a efecto de localización observados en electrones ordinarios. Además se ha establecido experimentalmente que los electrones pueden propagarse sin dispersión a través de distancias del orden de micrómetros en grafeno (Novoselov *et al.*, 2004).

Las fuentes de desorden en grafeno son muchas y pueden variar, desde las comúnmente encontradas en semiconductores, tales como las impurezas, átomos o moléculas absorbidos en la superficie, hasta los más inusuales, como las corrugaciones asociadas a la naturaleza elástica del grafeno (Meyer *et al.*, 2007). El grafeno es un material único, en el sentido que comparte las propiedades de las membranas suaves y al mismo tiempo se comporta de manera metálica, del tal forma que los fermiones de Dirac se pueden propagar en un espacio curvado localmente. Esta es la razón de la analogía con el problema de la gravedad cuántica (Castro Neto *et al.*, 2009). El grafeno muestra también efectos mesoscópicos inusuales asociados con las condiciones de frontera. Estos efectos se hacen evidentes en los sistemas confinados basados en grafeno, como en las nanocintas. En estas últimas, sus propiedades electrónicas pueden variar drásticamente dependiendo de sus fronteras o terminaciones: zigzag o armchair (las más comunes).

En este capítulo haremos una breve presentación de las propiedades electrónicas del grafeno que son relevantes a nuestro trabajo. En la sección 4.1 presentamos la aproximación de amarre fuerte para grafeno. En la sección 4.2 describiremos la estructura de bandas del grafeno, así mismo en la sección 4.3 derivamos el hamiltoniano efectivo de bajas energías. Por último, en la sección 4.4 describiremos las propiedades fundamentales de las nanocintas de grafeno, principalmente de su estructura de bandas.

4.1 Modelo en aproximación de amarre fuerte para grafeno

Consideramos la dinámica de electrones en una red de grafeno asumiendo que los efectos de interacciones pueden ser incorporados en términos de campo medio (esto es aproximación de partículas no interactuantes). En este caso, el hamiltoniano de una sola partícula es

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ef}(\mathbf{x}) + V_{ext}(\mathbf{x}), \quad (185)$$

donde $V_{ef}(\mathbf{x})$ incorpora los potenciales provenientes de los iones atómicos de la red de grafeno y los efectos de interacción de manera aproximada, y $V_{ext}(\mathbf{x})$ es algún potencial externo. En el caso de una hoja infinita de grafeno V_{ef} tiene todas las simetrías del grafeno. A continuación presentaremos la formulación en aproximación de amarre fuerte de este sistema, siguiendo el análisis de Wallace (1947) y basándonos en la exposición presentada en Wimmer (2005).

Siendo el carbono el sexto elemento de la tabla periódica tiene 4 electrones de valencia con la configuración $2s^2 2p^2$. Tres de estos electrones se hibridizan en una configuración $2sp^2$ y forman enlaces con los átomos vecinos, dando lugar a un arreglo hexagonal de átomo de

carbono (véase Fig.4.1a). El cuarto electrón reside mayormente en el orbital perpendicular al plano del grafeno $2p_z$, que está hibridizado y se le conoce como orbital π . Los electrones que forman los enlaces entre átomos vecinos no contribuyen al transporte y por tanto podemos tratar al grafeno como si tuviera un electrón por átomo de carbono en el orbital $2p_z$.

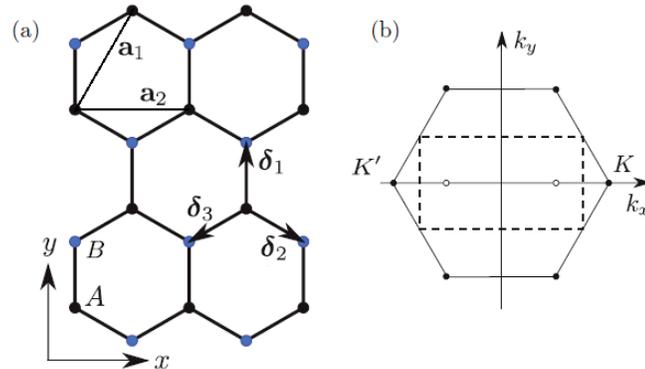


Figura 16. (a) Esquema de la estructura del grafeno con ambas redes A y B . (b) zonas de Brillouin para ambas celdas, unitaria y cuadrada.

Siguiendo los argumentos anteriores, describimos el grafeno en la aproximación de amarre fuerte con solo un orbital por átomo base. La estructura del grafeno puede verse como una red triangular con una base de dos átomos por celda unitaria. Los vectores de red pueden escribirse como,

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 3), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 0), \quad (186)$$

donde $a \approx 1.42 \text{ \AA}$ es la distancia entre átomos vecinos y $\bar{a} = \sqrt{3}a = 2.46 \text{ \AA}$ el parámetro de red. Los vectores de la red recíproca correspondiente son,

$$\mathbf{b}_1 = \frac{4\pi}{3a}(0, 1), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(3\sqrt{3}, -1). \quad (187)$$

Así, la simetría de la red cristalina se refleja en la red recíproca (véase Fig.4.1b). En el espacio recíproco, la primera zona de Brillouin tiene forma hexagonal, está centrada en el punto Γ y las esquinas son los puntos K y K' , dados por

$$\mathbf{K} = \left(\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0\right), \quad \mathbf{K}' = \left(-\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0\right). \quad (188)$$

Estos puntos son también llamados puntos de Dirac, por razones que más adelante se harán evidentes. Los tres vectores entre átomos vecinos inmediatos en el espacio real están dados de la siguiente manera (véase Fig.4.1),

$$\boldsymbol{\delta}_1 = a(0, 1) \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, -1), \quad \boldsymbol{\delta}_3 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}, -1). \quad (189)$$

Consideramos que en cada sitio atómico i con posición \mathbf{R}_i hay un orbital descrito por la función,

$$\chi_{\mathbf{R}_i}(\mathbf{x}) = \chi(\mathbf{x} - \mathbf{R}_i). \quad (190)$$

En este análisis ignoraremos el grado de libertad de espín. Denotaremos el estado cuántico con función de onda $\chi_{\mathbf{R}_i}(\mathbf{x})$ como $|i\rangle$. Asumimos estos estados como ortogonales y en términos de ellos escribimos el hamiltoniano

$$H = \sum_{i,j} \langle i|H|j\rangle |i\rangle \langle j|. \quad (191)$$

La solución de este sistema es de la forma,

$$|\Psi\rangle = \sum_i \psi(i) |i\rangle, \quad (192)$$

donde $\psi(i)$ es la amplitud de probabilidad de ocupar el estado orbital $|i\rangle$. Así $|\psi(i)|^2$ puede verse como la probabilidad de que el electrón esté cerca del sitio atómico i . El hecho de que los orbitales atómicos estén localizados valida el uso de la aproximación de amarre fuerte para grafeno. Aquí solo consideraremos elementos del hamiltoniano que involucran orbitales en el mismo sitio y entre sitios vecinos inmediatos.

Los elementos matriciales del hamiltoniano que involucran orbitales en el mismo sitio pueden escribirse como $t_{ii} = \varepsilon_0 + \varepsilon_i$, donde ε_0 surge de la parte del hamiltoniano con la periodicidad de la red, $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ef}$, y ε_i de V_{ext} . Debido a la periodicidad de la red, el término ε_0 es idéntico para todos los sitios por lo que se puede tomar como cero. Para el potencial externo es útil descomponerlo en una dependencia simétrica y antisimétrica con respecto de la subred y escribirlo como sigue,

$$\varepsilon_i = \begin{cases} V_i + M_i & \text{si } i \in \text{subred } A, \\ V_i - M_i & \text{si } i \in \text{subred } B. \end{cases} \quad (193)$$

Aquí, V_i es un potencial con el mismo valor para los dos átomos en una celda unitaria, mientras M_i es el llamado potencial escalonado, que cambia de signo entre las dos subredes. El potencial escalonado puede surgir por un potencial externo con variaciones rápidas, como el causado por un substrato o por la deformación de la red de grafeno. Los términos no diagonales, que involucran orbitales en diferentes sitios son,

$$t_{ij} = -t_0 \equiv \delta_{1,|i-j|} \int \chi(\mathbf{x} - \mathbf{R}_i)^* \chi(\mathbf{x} - \mathbf{R}_j) dx^3, \quad (194)$$

donde la función δ es la función delta de Kronecker, $t_0 = 2.7$ eV. En presencia de campo magnético, este término se modifica por una fase de Peierls (Datta, 1995),

$$t_{ij} \rightarrow t_{ij} \times \exp\left(\frac{ie}{\hbar} \int_{R_j}^{R_i} ds \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x})\right), \quad (195)$$

donde $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ es el potencial vectorial.

4.2 Estructura de bandas

Después de introducir el modelo de amarre fuerte, calculamos la estructura de bandas para una hoja infinita de grafeno con $M_i = M$ y $V_i = V_0$. En este caso, el sistema es invariante ante traslaciones y se cumple el teorema de Bloch Wimmer (2005). Definimos los orbitales en el espacio de Fourier,

$$\Phi_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_i \in \alpha} e^{i\mathbf{k}R_i} \chi_i(\mathbf{x}), \quad (196)$$

donde $\alpha = A, B$ indica la subred y N es el número de celdas unitarias. Estos estados cumplen la condición de ser ortonormales,

$$\langle \Phi_\alpha(\mathbf{k}) | \Phi_\beta(\mathbf{k}') \rangle = \delta_{\alpha,\beta} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}, \quad (197)$$

y cumplen el teorema de Bloch. De esta manera, forman una base en la que podemos expresar el problema de eigenvalores. La solución será de la forma,

$$\psi(\mathbf{k}, \mathbf{x}) = \psi_A(\mathbf{k}) \Phi_A(\mathbf{k}, \mathbf{x}) + \psi_B(\mathbf{k}) \Phi_B(\mathbf{k}, \mathbf{x}), \quad (198)$$

donde \mathbf{k} es el vector de Bloch. Así mismo escribimos la ecuación de Schrödinger estacionaria, $H(\mathbf{k})\psi(\mathbf{k}, \mathbf{x}) = E(\mathbf{k})\psi(\mathbf{k}, \mathbf{x})$, como sigue,

$$H(\mathbf{k})\psi(\mathbf{k}, \mathbf{x}) = \begin{pmatrix} H_{AA}(\mathbf{k}) & H_{AB}(\mathbf{k}) \\ H_{BA}(\mathbf{k}) & H_{BB}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A(\mathbf{k}) \\ \psi_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = E(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} \psi_A(\mathbf{k}) \\ \psi_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (199)$$

Los elementos de matriz del hamiltoniano se obtienen de calcular, $H_{\alpha,\beta} = \langle \Phi_\alpha(\mathbf{k}) | H | \Phi_\beta(\mathbf{k}) \rangle$. Los términos diagonales están dados por,

$$\langle \Phi_A(\mathbf{k}) | H | \Phi_A(\mathbf{k}) \rangle = V_0 + M, \quad (200)$$

$$\langle \Phi_B(\mathbf{k}) | H | \Phi_B(\mathbf{k}) \rangle = V_0 - M. \quad (201)$$

Mientras los términos fuera de la diagonal son,

$$\langle \Phi_A(\mathbf{k}) | H | \Phi_B(\mathbf{k}) \rangle = -t_0 \sum_{l=1}^3 \cos(\mathbf{k}\boldsymbol{\delta}_l) + i \text{sen}(\mathbf{k}\boldsymbol{\delta}_l), \quad (202)$$

y $H_{BA}(\mathbf{k}) = [H_{AB}(\mathbf{k})]^*$. Entonces la base de Fourier vuelve diagonal al hamiltoniano, para quedar

$$H(\mathbf{k}) = V_0 \sigma^0 - \left(t_0 \sum_{l=1}^3 \cos(\mathbf{k}\boldsymbol{\delta}_l) \right) \sigma^x + \left(t_0 \sum_{l=1}^3 \text{sen}(\mathbf{k}\boldsymbol{\delta}_l) \right) \sigma^y + M \sigma^z, \quad (203)$$

donde $\sigma^{0,x,y,z}$ son la identidad y las matrices de Pauli. La descomposición del hamiltoniano en términos de estas matrices viene de aprovechar la completez de éstas para el espacio de las matrices hermitianas de 2×2 . Sin embargo, esta formulación, en la que se separa explícitamente la descripción para las subredes, hace natural –debido al álgebra que siguen las matrices de Pauli– la convención de llamar a este grado de libertad *Pseudoespín*. Esta analogía se hará más evidente en la aproximación de bajas energías. Con el hamiltoniano en la base k de Ec.203 es trivial encontrar los eigenvalores, dados por

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = V_0 \pm \sqrt{M^2 + t_0^2 \left(3 + 2 \cos(k_x \bar{a}) + 4 \cos\left(\frac{k_x \bar{a}}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3} k_y \bar{a}}{2}\right) \right)}. \quad (204)$$

La figura 17 muestra las energía $E_{\pm}(\mathbf{k})$, en la primera zona de Brillouin de grafeno, para

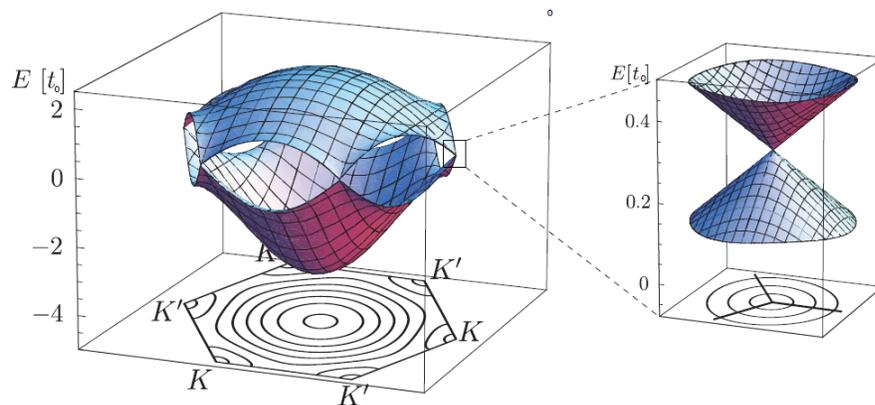


Figura 17. Izquierda: Estructura de bandas de grafeno para $M = V_0 = 0$. Derecha: Acercamiento de la estructura de bandas alrededor del punto K . Tomada de Wimmer (2005).

$M = V_0 = 0$. En este caso las bandas $E_+(\mathbf{k})$ y $E_-(\mathbf{k})$ están restringidas a ser positivas y negativas y son llamadas la banda de conducción y de valencia, respectivamente. Ambas bandas se tocan en seis puntos de la zona de Brillouin a $E = 0$, formando un hexágono. Ya que cada átomo en la celda unitaria contribuye con un electrón, la banda de valencia está completamente llena. Así el nivel de Fermi, es $E_F = 0$ y los estados a la energía de Fermi tienen vectores de onda \mathbf{K} y \mathbf{K}' . A estos puntos se les llama puntos de Dirac porque a energías bajas cercanas a cero la relación de dispersión puede aproximarse como lineal. Esto se muestra en el acercamiento de la Fig.17, que muestra los conos de Dirac. A pesar de que hemos calculado esta relación de dispersión considerando solo los primeros vecinos, el resultado es muy cercano a los experimentos. La Fig.18 muestra los resultados experimentales de mediciones de la estructura de bandas en grafeno con la técnica conocida como espectroscopía de fotoemisión con resolución angular (ARPES, por sus siglas en Inglés).

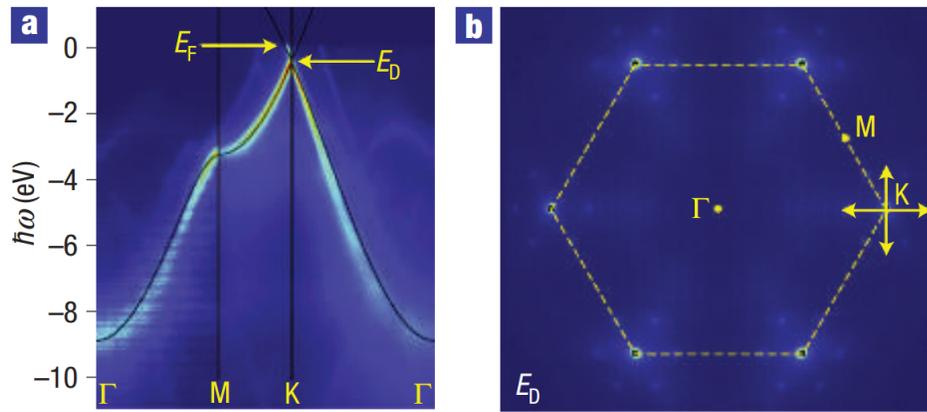


Figura 18. Estructura de bandas del grafeno medida experimentalmente utilizando la espectroscopía de fotoemisión con resolución angular. (extraída de Bostwick *et al.* (2007))

4.3 Hamiltoniano efectivo

A continuación derivaremos un hamiltoniano aproximado que describe a los electrones en grafeno a bajas energías. Este hamiltoniano efectivo fue originalmente derivado por McClure (1956) en presencia de campo magnético y por DiVincenzo y Mele (1984) en presencia de un potencial externo. Ambos siguieron el enfoque de masa efectiva desarrollado por Luttinger y Kohn (1955).

En general, la presencia de un potencial externo rompe la invariancia traslacional. Dicho potencial puede dispersar electrones conectando diferentes vectores de Bloch. Así la solución para la función de onda debe incluir de manera continua todos los posibles valores del vector de momento, esto es

$$\psi(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{k} \psi_A(\mathbf{k}) \Phi_A(\mathbf{k}, \mathbf{x}) + \psi_B(\mathbf{k}) \Phi_B(\mathbf{k}, \mathbf{x}). \quad (205)$$

Si asumimos que el potencial externo varía lentamente en comparación con las distancia entre átomos, podemos despreciar los eventos dispersivos que mezclan momentos alrededor de los puntos \mathbf{K} y \mathbf{K}' , pues están separados por un vector de onda del orden de la red recíproca. Otra forma de introducir esta aproximación es a través de un criterio en energía, si se está interesado en energías cercanas al nivel de Fermi, la estructura de bandas se ve como seis conos separados que se pueden describir de manera independiente. Nótese que aunque hay 6 vectores K , solo dos son distintos, o sea, no se pueden conectar por un vector de la red recíproca.

Desarrollando la expresión para las bandas de energías alrededor del punto de Dirac,

obtenemos,

$$E_{\pm}(\mathbf{K} + \mathbf{q}) = E_{\pm}(\mathbf{K}' + \mathbf{q}) \approx \hbar|\mathbf{q}|v_F, \quad (206)$$

donde $v_F = \sqrt{3}t_0a/2\hbar$ es la velocidad de Fermi. Este desarrollo también se puede aplicar a la función de onda, para obtener,

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}) = & \int d\mathbf{q} \psi_A(\mathbf{q}) \Phi_A(\mathbf{K} + \mathbf{q}, \mathbf{x}) + \psi_B(\mathbf{q}) \Phi_B(\mathbf{K} + \mathbf{q}, \mathbf{x}) \\ & + \psi'_A(\mathbf{q}) \Phi_A(\mathbf{K}' + \mathbf{q}, \mathbf{x}) + \psi'_B(\mathbf{q}) \Phi_B(\mathbf{K}' + \mathbf{q}, \mathbf{x}). \end{aligned} \quad (207)$$

De manera similar, se pueden calcular los elementos de matriz de hamiltoniano, dados por $\langle \Phi_{\alpha}(\mathbf{K}^{(\prime)} + \mathbf{q}) | H | \Phi_{\beta}(\mathbf{K}^{(\prime)} + \mathbf{q}') \rangle$. El resultado se simplifica si se realizan las siguientes aproximaciones: (1) nos restringiremos al régimen de bajas energías, aproximando alrededor de los puntos K y (2) mantenemos solo los términos de orden lineal en \mathbf{q} . Aprovechando que el hamiltoniano no mezcla momentos en diferentes conos de Dirac, introducimos la variable $\tau = \pm 1$ que indica el valle (la K) en la que se hace el desarrollo, $\tau = 1$ si \mathbf{K} o $\tau = -1$ si \mathbf{K}' . El hamiltoniano resultante es,

$$H(\mathbf{K}_{\tau} + \mathbf{q}) \approx \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \tau q_x - iq_y \\ \tau q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} = \hbar v_F (\tau q_x \sigma^x - iq_y \sigma^y). \quad (208)$$

La misma consideración, de variación lenta, se aplica al potencial externo y finalmente el hamiltoniano para ambos valles se puede escribir de la siguiente manera,

$$H_K = v_F (i\hbar \nabla) \cdot \boldsymbol{\sigma} + V(\mathbf{x}) + M(\mathbf{x}) \sigma^x. \quad (209)$$

$$H_{K'} = -v_F (-i\hbar \nabla) \cdot \boldsymbol{\sigma}^* + V(\mathbf{x}) + M(\mathbf{x}) \sigma^x. \quad (210)$$

El hamiltoniano 209 es idéntico al hamiltoniano de Dirac bidimensional con una velocidad de la luz efectiva v_F . El potencial $V(\mathbf{x})$ juega el papel de potencial escalar mientras el potencial escalonado $M(\mathbf{x})$ aparece como un término de masa.

4.4 Nanocintas de grafeno

Los resultados anteriores aplican para hojas de grafeno infinitas o suficientemente grandes para despreciar los efectos de las fronteras. En general, estructuras basadas en grafeno exhiben algunas de las peculiaridades de este material pero también introducen otras nuevas. En particular las nanocintas de grafeno, que son sistemas mesoscópicos infinitos en una dirección pero confinados en otra, manifiestan de manera excepcional los efectos de las fronteras. Se denota a las nanocintas dependiendo de sus fronteras, esto es, la dirección de corte. Según

nuestra convención de ejes coordenados en la Fig.4.1, una nanocinta con corte en la dirección horizontal se llamará cinta *zigzag*. Correspondientemente, una cinta con corte en la dirección vertical, se llamará *armchair*. Debido a que las nanocintas no cuentan con total invariancia traslacional, los estados electrónicos serán combinaciones de ondas de Bloch de la hoja infinita, una suma de diferentes vectores de onda para satisfacer la condición de frontera –de manera similar como ocurre con el pozo de potencial infinito.

Consideramos primero las nanocintas *zigzag*. Las cintas *zigzag* tienen simetría traslacional en la dirección horizontal x , con celda unitaria de longitud a , como se indica en Fig.19a, y así $k_x \in [-\pi/\bar{a}, \pi/\bar{a}]$ es un buen número cuántico. Los estados en la cinta son una combinación lineal de ondas de Bloch con número fijo k_x , como se indica en el bosquejo de la zona de Brillouin en Fig.19a. En particular, los diferentes puntos K se proyectan unívocamente en el eje k_x , con $k_x = -2\pi/3\bar{a}$ para el punto K y $k_x = +2\pi/3\bar{a}$ para el punto K' . Así el punto K y el punto K' están desacoplados en las nanocintas *zigzag*. En el régimen de energías bajas observamos los conos de Dirac en la estructura de bandas (regiones en gris). Este argumento no alcanza para explicar la aparición de la banda a energía cero, que se asocia a los estados de borde. En realidad la condición de frontera *zigzag* hace que k_x y k_y no sean independientes a energía cero. Son independientes para todas las otras energías excepto para energía cero, donde k_y se vuelve dependiente de k_x y viceversa. En contraste, para las

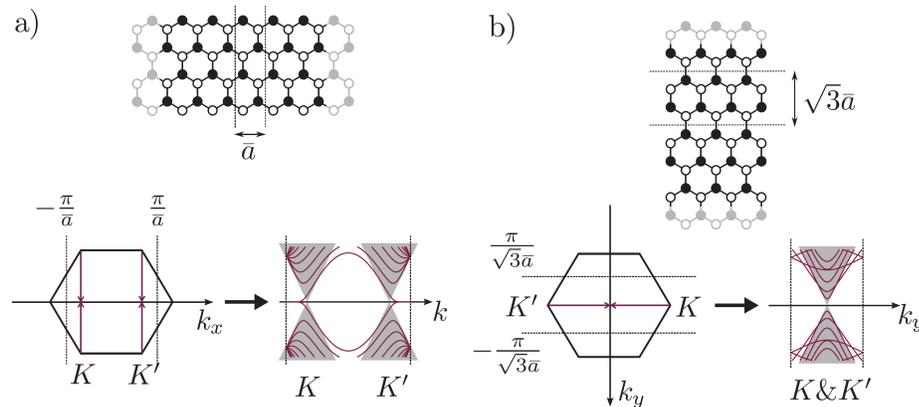


Figura 19. Características generales de las estructuras de bandas para nanocintas con terminaciones *zigzag* a) y *armchair* b). Los paneles superiores muestran nanocintas de grafeno y sus correspondientes celdas unitarias. Los paneles inferiores muestran la orientación de la zona de Brillouin para el caso de una nanocinta unidimensional, así como la estructura de bandas correspondiente (extraída de Wimmer (2005))

nanocintas *armchair* la simetría traslacional es en la dirección vertical y , con celda unitaria $3a$. Entonces, $k_y \in [-\pi/3a, \pi/3a]$ es un buen número cuántico. Así los estados en las nanocintas *armchair* son combinaciones lineales de los estados de bulto de grafeno con k_y

fijo. En particular ambos puntos de Dirac, K y K' se mapean en $k_y = 0$. Por lo tanto en cintas con esta clase de terminación, la frontera mezcla ambos valles.

Capítulo 5

Transporte en nanocintas de grafeno con deformaciones gaussianas

En este capítulo se describen los resultados obtenidos de estudiar el transporte electrónico en una nanocinta de grafeno con una deformación gaussiana en su centro y conectada a contactos. Se considera además la presencia de un campo magnético y terminaciones armchair y zigzag. En la sección 5.1 se hace una revisión de la literatura relevante a nuestro trabajo. Ésta no pretende ser una revisión exhaustiva, principalmente por la gran cantidad de trabajos en el tema y porque dicho propósito escapa de los objetivos del presente trabajo de tesis. En la sección 5.2 se presentan los detalles del modelo para las nanocintas con deformaciones y finalmente en la sección 5.3 se presentan y discuten los resultados.

5.1 Efectos de deformaciones en el transporte electrónico en grafeno

Para el momento en el que Novoselov *et al.* (2004) sintetizaron el grafeno, Wallace (1947) ya había descrito el hamiltoniano que describe el movimiento de los electrones en esa estructura cristalina. Asimismo se sabía, del estudio de los fonones en nanotubos de carbono realizado por Suzuura y Ando (2002), que una deformación en la red afecta dicho hamiltoniano de dos maneras: 1) Modifica los términos diagonales asociados a la energía de sitio y 2) cambia los términos no diagonales que describen los saltos electrónicos entre sitios vecinos, al modificar la longitud del enlace. Ambos efectos se pueden expresar como potenciales en el hamiltoniano, el primero como un potencial escalar y el segundo como un potencial de norma que se interpreta usualmente como un pseudo-campo magnético (por razones que más adelante se harán evidentes). Lo anterior toma especial relevancia en el grafeno, ya que al ser un cristal bidimensional con un solo átomo de grosor, no tiene la rigidez de los cristales tridimensionales. Como señala Castro Neto *et al.* (2009), el grafeno se puede describir como una membrana suave, y como tal, desarrolla distorsiones en su estructura producto de las fluctuaciones térmicas o de la interacción con el sustrato sobre el cual está depositado.

Los resultados experimentales de Meyer *et al.* (2007) mostraron que el grafeno suspendido—resultado de depositarlo sobre una rejilla de óxido de silicio— presenta corrugaciones. Dichas corrugaciones hacen a la membrana de grafeno termodinámicamente estable permitiendo

su existencia. Estudios posteriores realizados primero por Frank *et al.* (2007) y luego Lee *et al.* (2008) y Gómez-Navarro *et al.* (2008) con microscopías de fuerza atómica –donde se caracterizan las propiedades elásticas de muestras de grafeno suspendidas– mostraron que la alta flexibilidad hace del grafeno un material muy resistente. Estos resultados experimentales revelan, siguiendo a Cadelano *et al.* (2009), un módulo de Young efectivo de 1TPa y tensiones límite de 130GPa. Ello permite que el grafeno pueda deformarse elásticamente hasta un 15 – 20%. Las evidencias experimentales acerca de las extraordinarias capacidades elásticas del grafeno motivaron una gran cantidad de trabajos –tanto teóricos como experimentales– en torno a las deformaciones y los efectos de las mismas en sus propiedades electrónicas.

El primer estudio considerando los efectos de las deformaciones en el transporte en grafeno, fue el trabajo de Morpurgo y Guinea (2006) donde se introduce la idea de tratar los efectos de las corrugaciones como un campo de norma en el hamiltoniano (véase capítulo anterior). En ese momento el interés principal era explicar los resultado experimentales de Morozov *et al.* (2006) que mostraron localización débil en grafeno.

Inicialmente los esfuerzos experimentales se orientaron en la caracterización de las deformaciones que se presentan en grafeno. Los primeros trabajos reportaron imágenes de microscopio STM de muestras grafeno sobre sustratos de SiO₂ con una topografía muy pronunciada, algunos ejemplos son los reportes de Ishigami *et al.* (2007), Geringer *et al.* (2009) y Xu *et al.* (2009). En general, estos reportes mostraron que la topografía del grafeno se veía modificada por el sustrato, además mostraron regiones de simetría triangular intercaladas con regiones con simetría hexagonal. De particular interés para la comunidad científica, resultaron los hallazgos de Levy *et al.* (2010). En éste trabajo se estudiaron burbujas triangulares formadas al depositar grafeno sobre platino. Ellos identificaron las resonancias en las curvas de densidad de estados obtenidas en regiones deformadas con la presencia de pseudo niveles de Landau producidos por pseudo campos magnéticos que –en consecuencia– se estimaron de más de 300T. De esta manera, los resultados de diferentes grupos experimentales mostraron que la morfología del grafeno está altamente determinada por la topografía sustrato sobre el que está depositado.

Estudios posteriores exploraron la capacidad de controlar deformaciones y sus efectos en el transporte. En el estudio pionero de Bunch *et al.* (2008) se presenta la creación de burbujas de grafeno. Ellos dispusieron una membrana de grafeno sobre un sustrato de SiO₂ con depresiones, obteniendo regiones de grafeno suspendido. Posteriormente, aplicaron una diferencia de presión sobre estas regiones, creando burbujas y mostrando que el grafeno es impermeable a diferentes gases –incluyendo el Helio. Bao *et al.* (2009) reportaron la

observación y la generación de ondulaciones periódicas en muestras de grafeno suspendidas. Utilizando la tensión generada por la suspensión y la tensión generada térmicamente, ellos mostraron que las ondulaciones siguen aproximadamente una distribución sinusoidal y fueron capaces de controlar la orientación y la longitud de onda de la oscilación. En el trabajo de Mashoff *et al.* (2010) se muestra la capacidad de controlar el grafeno con la punta del STM. Ellos depositaron grafeno sobre un sustrato de SiO_2 obteniendo regiones de grafeno suspendido. Después, utilizando el campo que genera la punta del STM fueron capaces de curvar el grafeno en esa zona. Las imágenes obtenidas reflejan una asimetría de subred. Por su lado, Georgiou *et al.* (2011) mostraron que las burbujas que se forman al depositar grafeno sobre SiO_2 pueden controlarse utilizando campos eléctricos externos. Klimov *et al.* (2012) crearon nano-tambores depositando grafeno sobre un sustrato con un patrón de huecos circulares y produjeron deformaciones controladas con la punta del STM.

Así hoy en día está bien establecido que el grafeno siempre presenta un tipo de deformación, ya sea por las corrugaciones que desarrolla por estar suspendido o por la interacción con el sustrato. Además se sabe que estas deformaciones son controlables y sus efectos medibles con las técnicas experimentales disponibles.

Desde el punto de vista teórico la caracterización de las deformaciones es el primer paso para el estudio de sus efectos. Las deformaciones pueden clasificarse de acuerdo a sus simetrías. Las deformaciones coplanarias modifican las distancias atómicas sólo en el plano de la membrana. En cambio, las deformaciones fuera del plano modifican las distancias atómicas en la dirección perpendicular. De estas, las deformaciones uniaxiales son aquellas que modifican las distancias atómicas que coinciden con solo una dirección cristalina. Mientras las deformaciones centro-simétricas modifican radialmente las distancias atómicas, definiendo un centro. Entre los primeros estudios sobre la forma en la que se puede curvar el grafeno está el estudio Kim y Neto (2008). Ellos proponen la teoría elástica de las membranas como un enfoque inicial para modelar la configuración del grafeno, utilizando la energía libre de torsión en el límite termodinámico. En un estudio posterior Viola Kusminskiy *et al.* (2011) modelaron el grafeno sobre un sustrato. Lo modelaron como una membrana continua con teoría de la elasticidad e introdujeron el sustrato como una superficie rugosa que interactúa con la membrana vía fuerzas de Van der Waals. Resultados basados en modelos atómicos se reportaron en los trabajos de Neek-Amal y Peeters (2012) y de Chen *et al.* (2013). donde utilizando simulaciones de dinámica molecular se estudió la interacción con el sustrato. De los estudios anteriores se puede concluir que en general el grafeno tiende a seguir al sustrato. Sin embargo, cuando la curvatura del sustrato es muy pronunciada el grafeno se desprende y queda suspendido. Este fenómeno depende del tamaño de la hoja de grafeno y del material

del que está hecho el sustrato.

En la literatura existen diferentes enfoques teóricos para estudiar la influencia de las deformaciones en la red sobre las propiedades electrónicas del grafeno. La forma más general es considerar la interacción electrón-fonón, que en principio permite tratar deformaciones con dependencia temporal como las que se generan por la interacción con un baño térmico. Mañes (2007) realizó el primer estudio en esta dirección, generalizó al grafeno el estudio de Suzuura y Ando (2002) para nanotubos de carbón: usando las simetrías del grafeno determinó las restricciones que debe cumplir el hamiltoniano de interacción electrón-fonón. En esta descripción, las deformaciones elásticas de la red pueden verse como perturbaciones estáticas. En su artículo ejemplificó sus resultados con la derivación de los pseudo campos electromagnéticos efectivos producto de las deformaciones.

De manera alternativa, Vozmediano, Katsnelson, y Guinea (2010) desarrollaron un enfoque basado en la teoría cuántica de campos en espacios curvados que describe las deformaciones fuera del plano. Por su parte, Winkler y Zülicke (2010), Linnik (2012) y Mañes *et al.* (2013) continuaron el enfoque basado en las consideraciones de simetría presentada por Mañes (2007) para estudiar diversos problemas en grafeno bajo estiramiento, tales como las implicaciones de la invariancia de inversión temporal de los pseudopotenciales y los efectos de la ruptura de simetría de inversión con respecto del plano, como la generada por la presencia de un sustrato. De particular interés es el trabajo de Mañes *et al.* (2013), donde usando teoría de grupos construyen todos los posibles términos que pueden aparecer en el hamiltoniano de bajas energías (Dirac) de grafeno producto de la aplicación de una deformación no uniforme en el espacio. Por otro lado Sloan *et al.* (2013), Barraza-Lopez *et al.* (2013), Pacheco Sanjuan *et al.* (2014a) y Pacheco Sanjuan *et al.* (2014b) formularon una descripción, basada en geometría diferencial discreta, de la estructura atómista de membranas bidimensionales y los efectos en las propiedades electrónicas. Sin embargo, la descripción teórica más popular para explorar el concepto de ingeniería del estiramiento combina la aproximación de amarre fuerte del hamiltoniano de grafeno con la teoría de elasticidad a orden lineal –que exponemos en la siguiente sección.

5.2 Modelo

Consideramos la región central de una nanocinta de grafeno (región verde en Fig. 20) en la que se ha dispuesto una deformación gaussiana fuera del plano en su centro y un campo magnético exterior constante en la dirección perpendicular al plano. La región central tiene

N_x posiciones atómicas en la dirección horizontal y N_y en la dirección vertical, formando una región rectangular. Utilizando la aproximación de amarre fuerte, podemos escribir el hamiltoniano para dicho sistema como sigue:

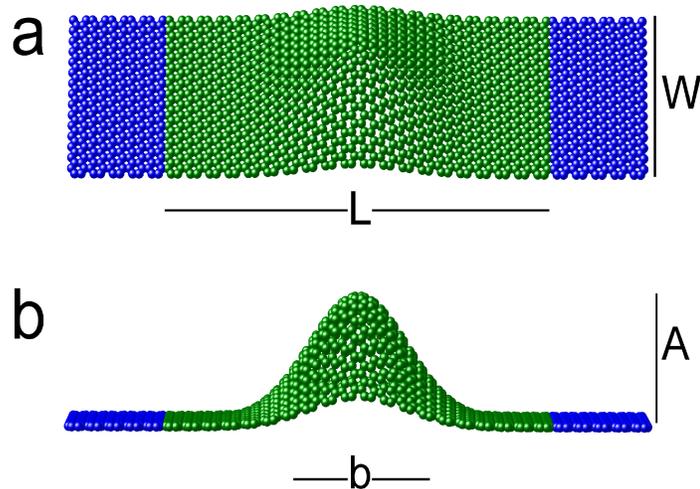


Figura 20. (Color online) Representación esquemática de una nanocinta de grafeno con una deformación gaussiana de amplitud A y anchura media b en su centro. La región central (verde), con longitud L y ancho W , está conectada a reservorios (azul), modelados como contactos infinitos de grafeno.

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \sum_{\langle i,n_l \rangle} t_0 c_i^\dagger c_{n_l} + \sum_{\langle i,n_r \rangle} t_0 c_i^\dagger c_{n_r}, \quad (211)$$

donde el primer término refiere a la región central (deformada), mientras el segundo y el tercero son los términos de conexión con los reservorios. Los índices i, j etiquetan a los sitios en la región central y n_l, n_r a los sitios en contacto con el reservorio de la izquierda y derecha, respectivamente. El operador c_i^\dagger (c_i) crea (aniquila) una partícula en el i -ésimo sitio. El factor t_{ij} es la energía asociada al tuneo entre los sitios vecinos inmediatos. En ausencia de campos y sin deformación toma el valor $t_0 = -2.8\text{eV}$ Castro Neto *et al.* (2009). Tanto la deformación gaussiana como el campo magnético modifican el parámetro de tuneo, t_{ij} , introduciendo los siguientes factores,

$$t_{ij} = t_0 \gamma_{ij} \Delta_{ij}. \quad (212)$$

El factor γ_{ij} refiere al potencial de norma magnético externo e introduce una fase dada por,

$$\gamma_{ij} = e^{i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}, \quad (213)$$

donde e es la carga del electrón, \hbar es la constante de Planck, \mathbf{r}_i es el vector de posición del i -ésimo sitio. El producto $\mathbf{A} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ viene de aproximar la integral de línea del vector

potencial a lo largo de la distancia entre los sitios, $r_i - r_j$. Nótese que el campo de norma está evaluado en el punto medio entre los sitios i y j , esto es $\mathbf{A}_{ij} = \left(B \frac{(y_i - y_j)}{2}, 0, 0 \right)$, que corresponde al centro de la celda unitaria de la red trigonal. El factor asociado a la deformación es real y está dado por

$$\Delta_{ij} = e^{-\beta \left(\frac{l_{ij}}{a} - 1 \right)}, \quad (214)$$

donde $a = 1.42\text{\AA}$ es la distancia entre sitios en ausencia de deformaciones y el coeficiente adimensional $\beta = 3.37$ (Castro Neto *et al.*, 2009). l_{ij} , la distancia entre sitios, se vuelve dependiente de la posición,

$$l_{ij} = \frac{1}{a} \left(a^2 + \varepsilon_{xx} x_{ij}^2 + \varepsilon_{yy} y_{ij}^2 + 2\varepsilon_{xy} x_{ij} y_{ij} \right), \quad (215)$$

a través del tensor de elasticidad,

$$\varepsilon_{\mu\nu} = \frac{1}{2} (\partial_\nu u_\mu + \partial_\mu u_\nu + \partial_\mu h \partial_\nu h). \quad (216)$$

Este último está caracterizado por la deformación, que contiene dos contribuciones: coplanaria u_ν y fuera del plano h (Landau y Lifshitz, 1970). En nuestro caso, consideramos una deformación gaussiana

$$h(x_i, y_i) = A e^{-\frac{(x_i - x_0)^2 + (y_i - y_0)^2}{b^2}}, \quad (217)$$

centrada en $(x_0; y_0)$ con $[x_0 = L/2, y_0 = W/2]$ el centro de la nanocinta. La deformación tiene amplitud A y ancho b (relacionado con la dispersión cuadrática media). La modificación en la energía de tuneo, dada por la Ec. 214, puede entenderse como un campo de norma (Vozmediano *et al.*, 2010) que genera un pseudo-campo magnético (Guinea *et al.*, 2009), pues se refleja en el tuneo de manera similar al término en la Ec. 213, proveniente del vector potencial magnético. Es importante señalar que la deformación gaussiana, además de este campo de norma, produce un potencial de deformación (Suzuura y Ando, 2002) o una modificación del potencial químico localmente. Los efectos de este potencial de deformación no se incluyen en esta discusión pero se detallan más adelante (véase sección 5.3.2).

5.3 Resultados y discusiones

5.3.1 Transporte con deformaciones

La Fig. 21 muestra la conductancia y la densidad de estados (DOS, por sus siglas en Inglés) para nanocintas con terminaciones *zigzag* (ZGNR, por sus siglas en Inglés) y *armchair*

(AGNR, por sus siglas en Inglés) en presencia de una deformación gaussiana de amplitud A y ancho b en su centro. Estos resultados fueron obtenidos con el método recursivo de la función de Green.

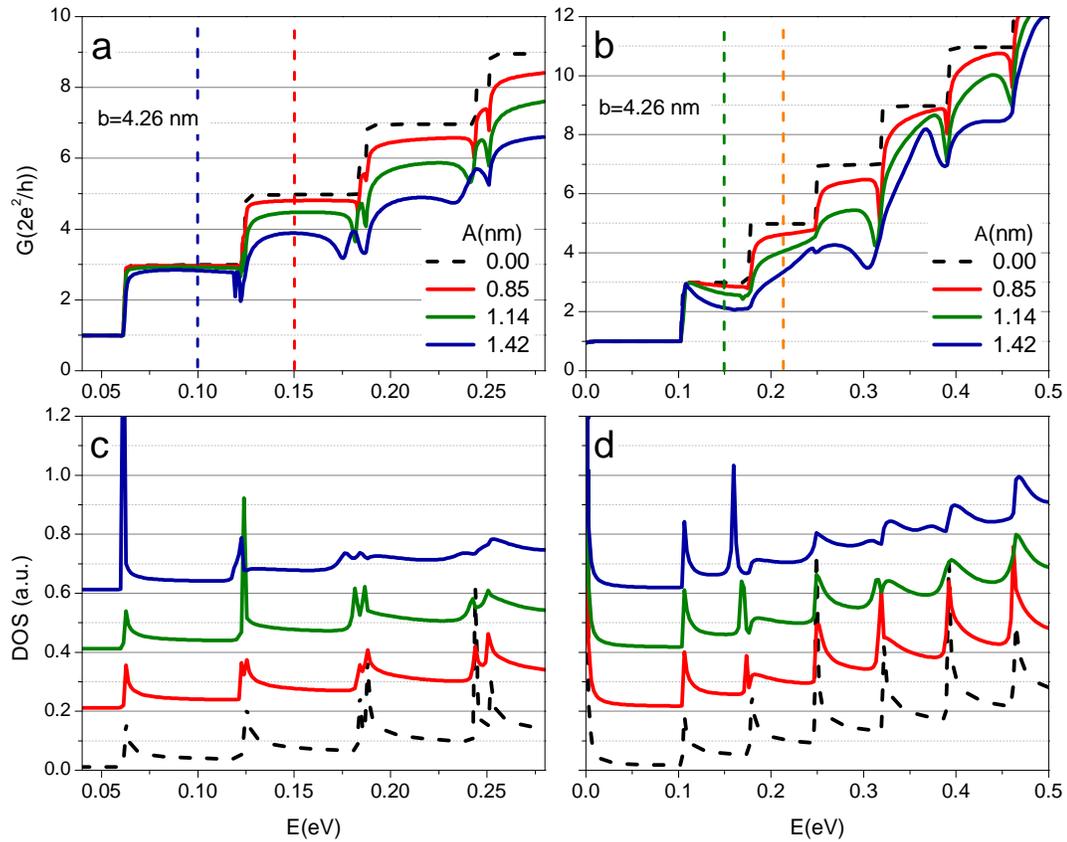


Figura 21. Conductancia (G) y densidad total de estados (DOS) de: AGNR ($W = 25.4\text{nm}$, $L = 28.0\text{nm}$) [a) y c)], y ZGNR ($W = 25.8\text{ nm}$, $L = 27.4\text{ nm}$) [b) y d)] para diferentes valores de la amplitud, A (0.85, 1.14 y 1.42 nm), y ancho fijo $b = 4.3\text{ nm}$, correspondientes a valores de estiramiento de 4, 7 y 11% respectivamente. Las líneas punteadas corresponden al sistema en ausencia de deformación. Los resultados para la DOS se graficaron con una traslación en el eje vertical para facilitar la visualización. Las líneas verticales indican las energías a las que se grafica la densidad local de estados en Fig. 23.

En esta figura se consideran diferentes valores de A y ancho, b , constante. En ambos casos la posición del centro de la deformación coincide con el centro geométrico del hexágono central de la nanocinta. Se realizaron cálculos variando la posición (dentro de un radio de $\sim 0.2\text{ nm}$) y se verificó que los resultados no se modifican de manera significativa. Las curvas muestran resultados para AGNR de 288 sitios atómicos de largo, correspondientes a $L = 30.7\text{ nm}$ y 245 sitios atómicos de ancho correspondientes a $W = 30.0\text{ nm}$; y ZGNR de 224 sitios atómicos de largo correspondientes a $L = 27.4\text{ nm}$ y 244 sitios atómicos- de ancho, correspondientes a $W = 25.8\text{ nm}$. Resultados similares se observaron con nanocintas con diferentes tamaños. Los paneles a) y b) muestran la conductancia para AGNR y ZGNR

respectivamente. Las líneas discontinuas negras corresponden a la conductancia en ausencia de deformación (ambas nanocintas son metálicas) y exhiben el comportamiento escalonado usual de sistemas con confinamiento transversal. Como se muestra en la figura, el escalón cero no se ve afectado por la presencia de la deformación; esto contrasta con los efectos de las deformaciones coplanarias uniaxiales estudiadas por Bahamon y Pereira (2013). Conforme A aumenta, el valor de la conductancia disminuye para energías posteriores a la aparición del primer escalón. Nótese las caídas pronunciadas en la conductancia antes de la aparición de ciertos escalones. Estas caídas han sido observadas en la conductancia de otros sistemas y se asocian a la mezcla de modos propiciada por la presencia de perturbaciones. El primero en explicarlos fue Bagwell (1990) que estudió el transporte en presencia de impurezas puntuales –modeladas como funciones delta de Dirac. Un estudio reciente mostrando este tipo de fenomenología es el trabajo de Gelabert y Serra (2010), donde estudian la conductancia a través de cables cuánticos semiconductores con regiones finitas con interacción espín-órbita tipo Rashba. La dramática disminución de la conductancia en el primer escalón para el caso de las ZGNR, que se hace más pronunciada al aumentar la amplitud de la deformación, sugiere un efecto de interferencia entre los estados confinados por la deformación.

Los paneles inferiores c) y d) muestran los resultados para la densidad total de estados –solo se muestra el rango positivo de energía en virtud de la simetría de partícula-hueco. De nuevo, la línea discontinua corresponde al caso en ausencia de deformación. Las líneas continuas corresponden a las deformaciones en los paneles a)-b) y están desplazadas en el eje vertical para facilitar su visualización. El panel d) muestra un pico a energía cero, correspondiente a los estados de borde característico de las ZGNR, que se mantiene sin modificación notable para las deformaciones mostradas (desde 4% hasta 11% de estiramiento). Conforme la deformación aumenta, el pico asociado al tercer escalón de la conductancia se comienza a partir. De los picos resultantes, el más alto se mueve a energías más bajas y aumenta su altura conforme se incrementa la amplitud, mientras el más bajo decrece. Este efecto se acompaña de transferencia de peso espectral: una disminución en la altura en los picos a energías mayores a una energía crítica, E_c ($E_c \simeq 0.18eV$ en el caso de mayor deformación) y un lento allanamiento de la curva. La disminución de la conductancia, combinada con la aparición de un incremento en la DOS sugiere la formación de un estado confinado a partir de los estados que antes eran propagantes. Nótese que el nuevo pico en la densidad de estados no marca el inicio de un escalón en la conductancia, como en el caso sin deformación.

La Fig. 22 muestra resultados similares para deformaciones con amplitud, A , fija y ancho, b , variable. En ella se observa la disminución en la conductancia, discutida anteriormente, de manera más pronunciada. Al igual que en la figura anterior (Fig. 21), el aumento en

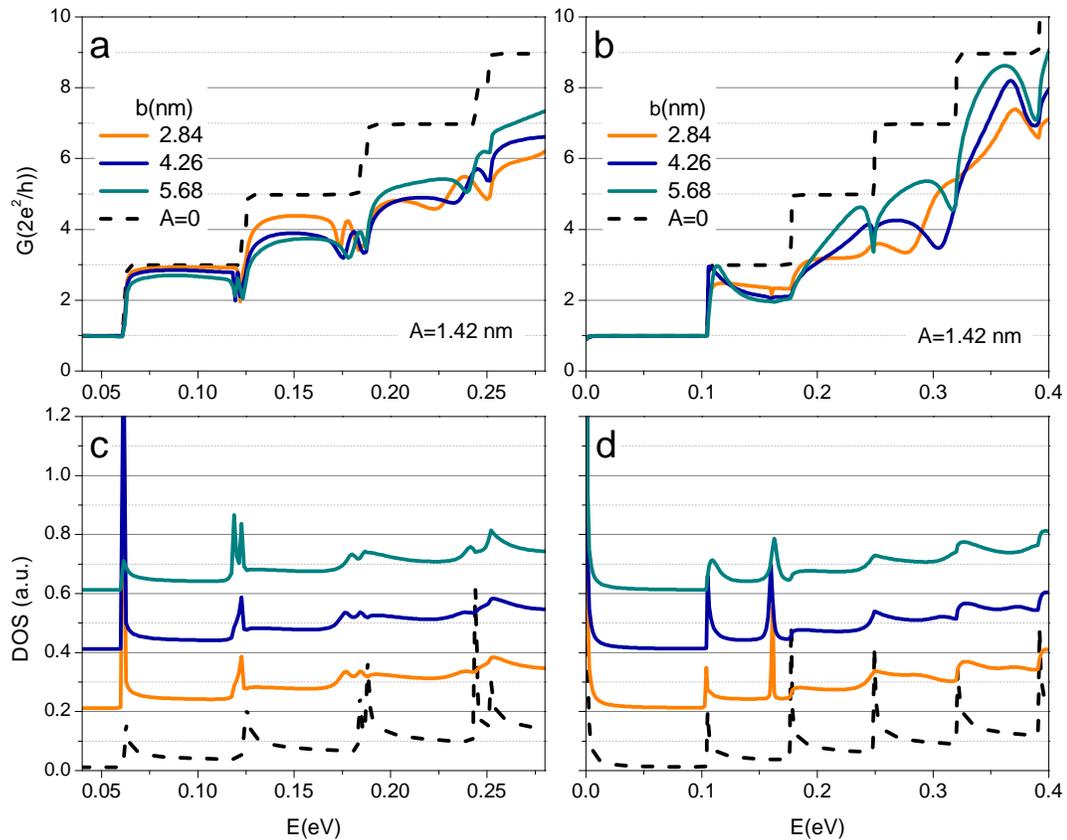


Figura 22. Conductancia (G) y densidad total de estados (DOS) de: AGNR ($W = 25.4$ nm, $L = 28.0$ nm) [a) y c)], y ZGNR ($W = 25.8$ nm, $L = 27.4$ nm) [b) y d)] para amplitud, A , fija y diferentes anchos, b (2.85, 1.14 y 1.42 nm), con valores de estiramiento de 25, 11 y 7% respectivamente. La línea discontinua negra corresponde al sistema sin deformación. Las curvas para la densidad de estados se han desplazado sobre el eje vertical para posibilitar su visualización

la curvatura de la deformación resulta en una menor conductancia. Cálculos para distintos valores de A y b revelaron que la energía correspondiente al aumento en la DOS (pico) depende cuadráticamente con la razón (A/b) —qué define el estiramiento. Este resultado se ha corroborado con cálculos basados en el modelo continuo (Dirac), en donde se introduce la deformación como un pseudo-campo magnético con teoría de perturbaciones.

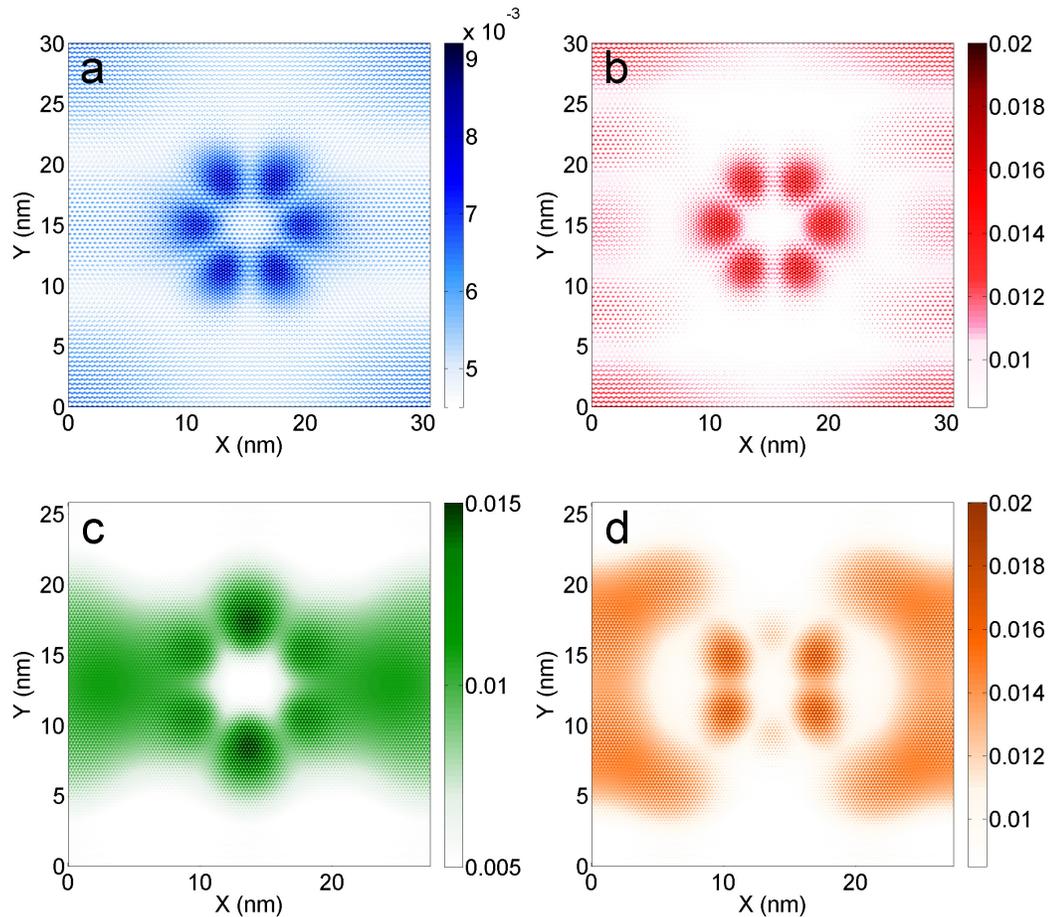


Figura 23. Densidad local de estados para: AGNR [páneos a), b)] y ZGNR [páneos c) y d)] con amplitudes de la deformación de $A = 1.42$ nm y $b = 4.3$ nm y energías marcadas con líneas verticales y correspondientes colores en la Fig. 21 : a) (azul) $E = 0.1$ eV, b) (verde) $E = 0.15$ eV, c) (rojo) $E = 0.15$ eV y d) (naranja) $E = 0.21$ eV. Las escalas en u.a. están optimizadas para exhibir claramente regiones con mayor densidad de estados.

La presencia de estiramiento no homogéneo (dependiente de la posición) tiene efectos profundos en la densidad local de estados (LDOS, por sus siglas en Inglés). Un análisis de la LDOS revela que en presencia de la deformación gaussiana se forma una estructura con simetría de 60° , misma que denominamos flor y, consecuentemente, pétalos a cada uno de los sectores de 60° que la forman. La Fig. 23 presenta la LDOS de las AGRN y ZGNR a las energías marcadas por líneas verticales en la Fig. 21. Nuestros cálculos demuestran que esta estructura persiste en un amplio rango de energías y parámetros de la deformación. Nótese

que las estructuras de flor en la LDOS para las ZGNR y AGNR están rotadas 90° una con respecto a la otra, respetando la naturaleza hexagonal de la red de grafeno y la simetría central de la deformación. Es importante señalar que en la literatura existen reportes de confinamiento generado por campos magnéticos reales, tanto en hojas de grafeno con la aproximación del continuo por De Martino *et al.* (2007), como en nanocintas de grafeno con la aproximación de amarre fuerte por Xu *et al.* (2008). Es importante señalar que, en nuestro caso, la concentración de estados sigue al pseudo-campo magnético generado por la deformación, véase los resultados de Faria *et al.* (2013).

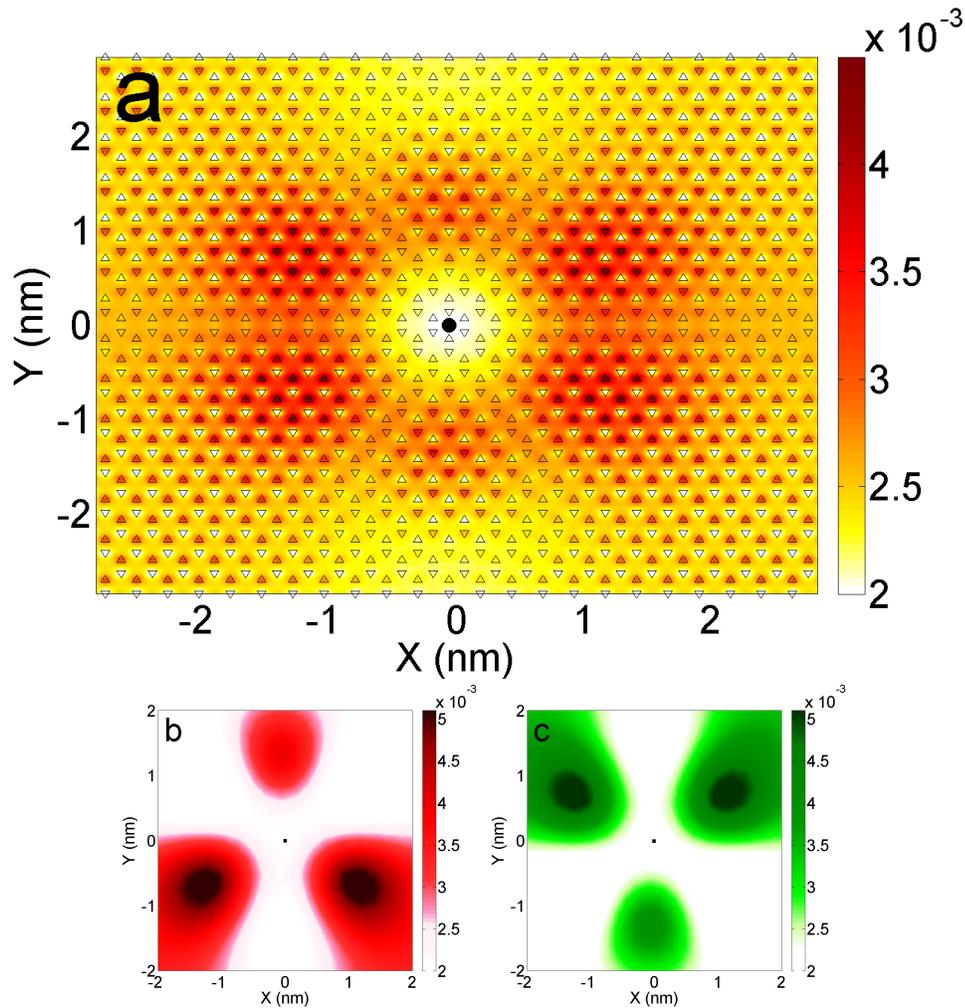


Figura 24. a) Densidad local de estados (LDOS) en u.a. para ZGNR de ancho $W = 25.8$ nm y largo $L = 27.3$ nm, en presencia de una deformación gaussiana de amplitud $A = 0.7$ nm y $b = 1.4$ nm, a energía $E = 0.042$ eV. Las posiciones atómicas para la red sin deformación están marcadas con triángulos: La subred A se indica con triángulos hacia arriba y la subred B con triángulos hacia abajo. El centro de la deformación gaussiana está marcado con un círculo negro. Los paneles b) y c) muestran la densidad local de estados para la subred A y B, respectivamente.

El modelo y la metodología utilizada nos permitieron realizar un estudio más detallado de

la distribución espacial de la LDOS, como muestra la Fig. 24 para una deformación con $A = 0.7$ nm y $b = 1.4$ nm. En esta figura, los sitios de la red sin deformación están representados por triángulos con la dirección de los mismos indicando la subred a la que pertenecen: los que apuntan hacia arriba señalan sitios de la subred A y los que apuntan hacia abajo señalan los de la subred B. El punto negro central indica el centro de la deformación gaussiana –el punto más alto de la membrana. Si se observa un pétalo en particular, se nota que la densidad de estados se concentra mayormente en una subred y que la relación entre la red ocupada y la no ocupada se intercambia entre pétalos vecinos. Es decir, existe una polarización local de subred o de pseudo-espín (en el lenguaje del continuo). La acumulación de estados causada por deformaciones ha sido predicha con los modelos de Dirac para el grafeno utilizando el formalismo de espacios curvados (de Juan *et al.*, 2007; Wakker *et al.*, 2011). Sin embargo, estos trabajos no reportaron una polarización de subred. Patrones similares, con simetría de 60° , se han obtenido en sistemas cerrados (sin contactos) de grafeno con deformaciones (Wakker *et al.*, 2011; Barraza-Lopez *et al.*, 2013; Moldovan *et al.*, 2013). Un tipo similar de polarización de subred ha sido predicha para grafeno en presencia de campo magnético externo (Goerbig, 2011). Sin embargo, es importante señalar dos diferencias fundamentales: 1) el campo magnético rompe la simetría de inversión temporal, el pseudo-campo magnético no; y 2) los niveles de Landau surgen en la presencia de campo magnético constante en el espacio, en nuestro caso, la deformación y por tanto el pseudo-campo magnético resultante depende del espacio. En torno al primer punto, es de relevancia notar que una deformación puede, en principio romper la asimetría de subred, que en el caso particular del grafeno está relacionada directamente con la simetría de inversión temporal. Con respecto al segundo punto, se podría argumentar que siempre es posible definir una región donde el pseudo-campo magnético varía lentamente, y se puede considerar constante. No obstante, los pseudo-campo magnéticos generados por deformaciones centrales (con simetría radial) presentan oscilaciones en la dirección angular con cambios de signo, por lo que los pseudo-niveles de Landau tendrían que ser localizados en estos sectores.

Los pánels b) y c) de la Fig.24 muestran la LDOS por subredes. Así en el panel b) solo se muestran tres de los seis pétalos. Nótese que entre estos pétalos existe una asimetría: dos de ellos –los inferiores– muestran regiones más oscuras, lo contrario ocurre en el panel c). Esta asimetría es causada por la geometría particular de las nanocintas: fronteras rígidas en la dirección transversal y elongación infinita en la longitudinal. En nanocintas zigzag, la condición de frontera transversal genera estados de borde. En este caso, se ha establecido que los efectos en el interior de la nanocinta decaen con el aumento del ancho de las nanocintas (Fujita *et al.*, ???). Se realizaron diferentes cálculos variando la relación entre el ancho de

la nanocinta y el ancho de la deformación, b/W . Si bien se observa que conforme esta razón disminuye la asimetría entre pétalos disminuye, siempre se obtuvo una diferencia apreciable.

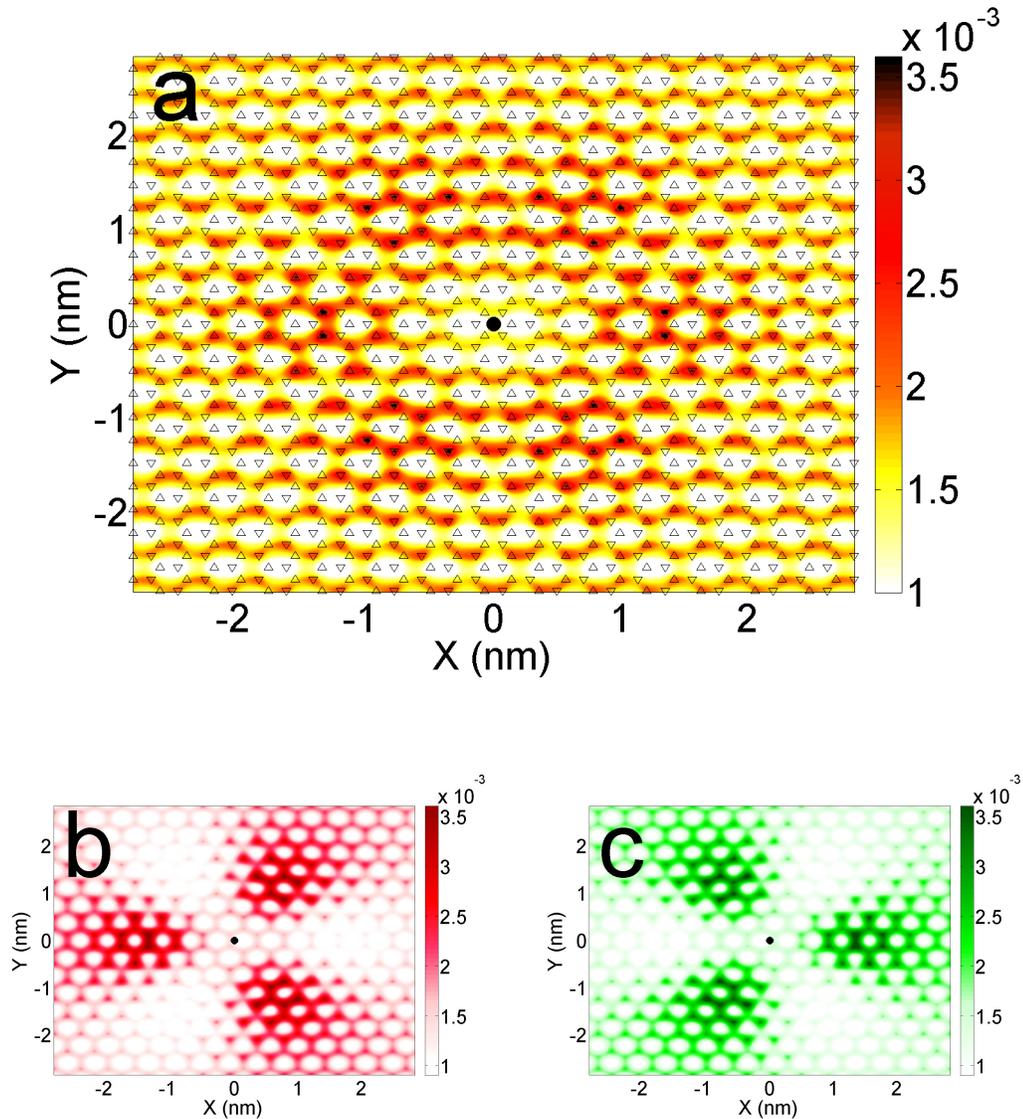


Figura 25. a) Densidad local de estados (LDOS) en u.a. para AGNR de ancho ($W = 25.4$ nm, $L = 28.0$ nm), en presencia de una deformación gaussiana de amplitud $A = 0.7$ nm y $b = 1.4$ nm, a energía $E = 0.042$ eV. Las posiciones atómicas para la red sin deformación están marcadas con triángulos: La subred A se indica con triángulos hacia arriba y la subred B con triángulos hacia abajo. El centro de la deformación gaussiana está marcado con un círculo negro. Los paneles b) y c) muestran la densidad local de estados para la subred A y B, respectivamente.

Para mostrar la independencia de nuestros resultados a la geometría de la cinta se realizaron cálculos para cintas armchair. Los resultados revelaron también una acumulación de estados con la misma alternación entre subredes. La Fig. 25 muestra la densidad de estados

para una nanocinta armchair de ancho $W = 25.4nm$ y largo $L = 28.0nm$ en presencia de una deformación gaussiana de amplitud $A = 0.7nm$ y $b = 1.4nm$. En ella se observa un patrón con simetría hexagonal con ondulaciones de máxima amplitud en líneas horizontales de átomos (dirección armchair). Esta oscilación en la densidad local de estados es producida por el confinamiento en la dirección transversal debido a los bordes. Recientemente, Wilhelm *et al.* (2014) reportaron oscilaciones similares en cintas sin deformaciones usando el formalismo de la teoría del funcional de la densidad determinando que provienen de considerar fronteras rígidas.

Con el objetivo de estudiar la polarización de subred, se realizaron cálculos en un amplio espectro de energías (válido dentro de la aproximación de amarre fuerte) y diferentes parámetros de la deformación. En todos los casos se encontró que la polarización persiste en las misma ubicación espacial independientemente de la energía. Como se señaló antes, existen diversos trabajos experimentales en los que se encontró polarización de subred en regiones con deformación en imágenes STM. En estos trabajos, atribuyen este efecto a una hibridización de los orbitales (Xu *et al.*, 2009; Geringer *et al.*, 2009; Burke y Crommie, 2014) causada por el levantamiento (fuera del plano) de una red respecto de la otra, y no a la deformación circular por sí misma. Nuestros resultados muestran que es posible encontrar polarización de subred sin tal hibridización.

5.3.2 Potencial de Deformación

En la aproximación de amarre fuerte, las deformaciones elásticas modifican el parámetro de tuneo (véase sección 5.2) y la energía de sitio (debido a cambios en el campo cristalino). El cambio en la energía de sitio se puede modelar a través del potencial escalar de deformación, un concepto introducido por Bardeen y Shockley (1950). Para materiales basados en el carbono, el potencial de deformación fue originalmente introducido por Suzuura y Ando (2002), quien, partiendo del acoplamiento electrón-fonón, derivó una expresión para este potencial válida en la aproximación de onda larga (fonones acústicos). Bajo estas condiciones, el potencial de deformación es,

$$V = g(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}), \quad (218)$$

donde g es la constante de acoplamiento y ε_{ii} el tensor de deformación en la dirección ii . Esta expresión, como otras derivadas también empíricamente (Sloan *et al.*, 2013), ha sido utilizada en trabajos anteriores para introducir cambios cualitativos en la estructura de bandas (Wakker *et al.*, 2011). Nótese que en grafeno el valor numérico de la constante de acoplamiento g no está bien establecido, sino que varía de 0 a -20 eV. Esta amplia variación

se atribuye al probable apantallamiento de este potencial (Vozmediano *et al.*, 2010).

Para una deformación gaussiana, el potencial de deformación obtenido de la Eq. 218 se escribe:

$$V(r) = \frac{gA^2}{b^2} \left(\frac{2r^2}{b^2} \right) e^{\left(\frac{-2r^2}{b^2} \right)}. \quad (219)$$

La Fig. 26 muestra la dependencia espacial del potencial de deformación dado por la Ec. 219, considerando una deformación gaussiana con amplitud $A = 1.4$ nm, anchura $b = 4.3$ nm, y constante de acoplamiento, $g = -3.0$ eV. Este potencial posee simetría axial e incrementa el confinamiento en una región anular. Como consecuencia, con su presencia se esperan cambios en las energías locales y por tanto corrimientos en las características de las curvas de conductancia y de densidad total de estados, más no en las características asociadas a su dependencia angular, como la estructura de flor que se forma en la densidad local de estados o la asimetría de subred. Ya que el valor de la constante de acoplamiento g es considerablemente indeterminado (Vozmediano *et al.*, 2010), es necesario analizar algunos casos límites para obtener el rango de variación de las cantidades de interés por su presencia. Presentamos resultados para la conductancia, densidad total de estados y densidad local de estados para diferentes valores de la constante de acoplamiento g en nanocintas con ambas terminaciones armchair y zigzag.

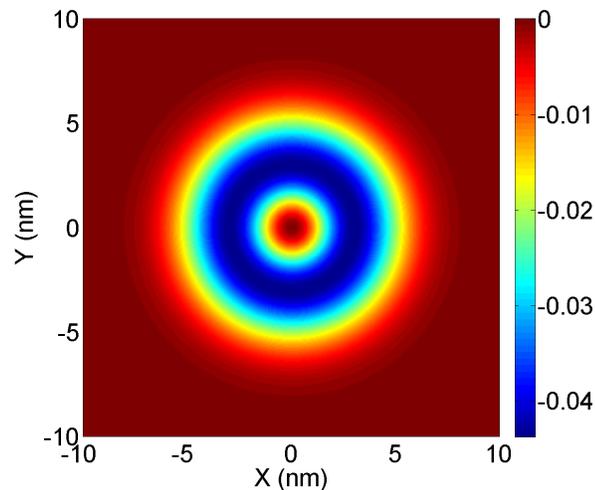


Figura 26. Potencial escalar de deformación producido por una deformación gaussiana con amplitud $A = 1.4$ nm, dispersión $b = 4.3$ nm y constante de acoplamiento $g = -3.0$ eV.

Conductancia y densidad total de estados

Las curvas mostradas en Fig. 27 presentan los resultados para la conductancia y densidad de estados para AGNR [páneos a) y c)], y ZGNR [páneos b) y d)]. En todos los páneos,

la curva negra punteada corresponde al caso en ausencia de deformación y se pone como referencia. Las curvas azul corresponden al caso en que el potencial de deformación está completamente apantallado ($g = 0$), mientras que las curvas rojo, verde y púrpura fueron producidas incluyendo un potencial de deformación con constante de acoplamiento $g = -1.0$ eV, $g = -2.0$ eV and $g = -3.0$ eV, respectivamente.

Primero analizamos los resultados para la conductancia, que se muestran en los paneles a) y b). El efecto principal de la deformación en la conductancia es una disminución general en los escalones de la conductancia conforme se aumenta la constante $|g|$. Para valores grandes de $|g|$, dos mínimos aparecen a energías cerca de la transición entre bandas. Los mínimos más anchos se vuelven más pronunciados conforme aumenta el valor de $|g|$. Este resultado concuerda con la interpretación de que estos mínimos corresponden a la mezcla de bandas o modos provocada por la deformación. Los mínimos más angostos se mueven a energías más bajas conforme aumenta $|g|$ (véase el acercamiento en la figura), esto es consistente con la interpretación de cambio local de energías, mencionado anteriormente.

Para los dos tipos de nanocintas, con terminación *armchair* o *zigzag*, las curvas de la conductancia muestran un comportamiento cualitativamente similar para los diferentes valores de g . Este resultado indica que los perfiles en las curvas de la conductancia son independientes del valor de g y sugieren que está mayormente determinado por la distribución espacial de la modificación del tuneo o pseudo-campo magnético. Es de hecho, el cambio en la orientación del transporte con respecto a esta distribución lo que genera las diferencias entre las cintas *armchair* y *zigzag*.

Cambios en la DOS también pueden identificarse como producidos por el potencial de deformación, como se muestra en los paneles c) y d). Como se describió anteriormente, nuevos picos en la DOS surgen de la transferencia espectral desde los picos asociados a las singularidades de van Hove hasta estos nuevos estados. Estos estados son confinados y se mueven a energías más bajas conforme se aumenta la magnitud del potencial de deformación. Nótese que para g finito, un pico adicional surge en la región del escalón cero. Picos similares se obtienen en presencia de deformación con mayor amplitud A (resultados no mostrados) y sin potencial de deformación.

El análisis anterior nos lleva a la conclusión que el efecto del potencial de deformación en la conductancia y DOS pueden describirse de manera general como que acentúa las características producidas por la modificación del tuneo (pseudo-campo magnético).

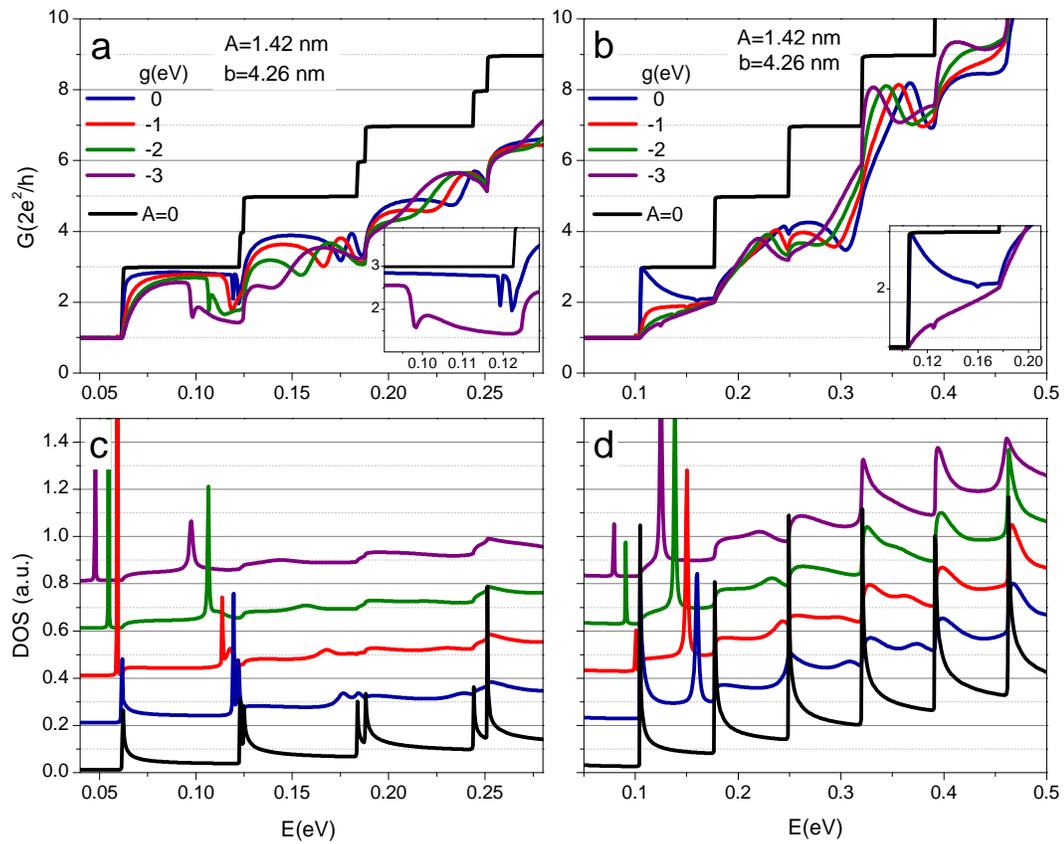


Figura 27. Efecto del potencial de deformación en la conductancia para AGNR ($W = 30.0$ nm, $L = 30.7$ nm) [a) y b)], y ZGNR ($W = 25.8$ nm, $L = 27.4$ nm) [c) y d)] nm para valores de $g = -1.0$ (rojo), -2.0 (verde), -3.0 (púrpura) eV. La deformación gaussiana tiene amplitud $A = 1.4$ nm y dispersión $b = 4.3$ nm. Las curvas negras corresponden a cantidades en ausencia de deformación. Las curvas azul son para $g = 0.0$ eV (y corresponden a las curvas azul de las figuras Fig. 21 y Fig.22).

LDOS y asimetría de subred

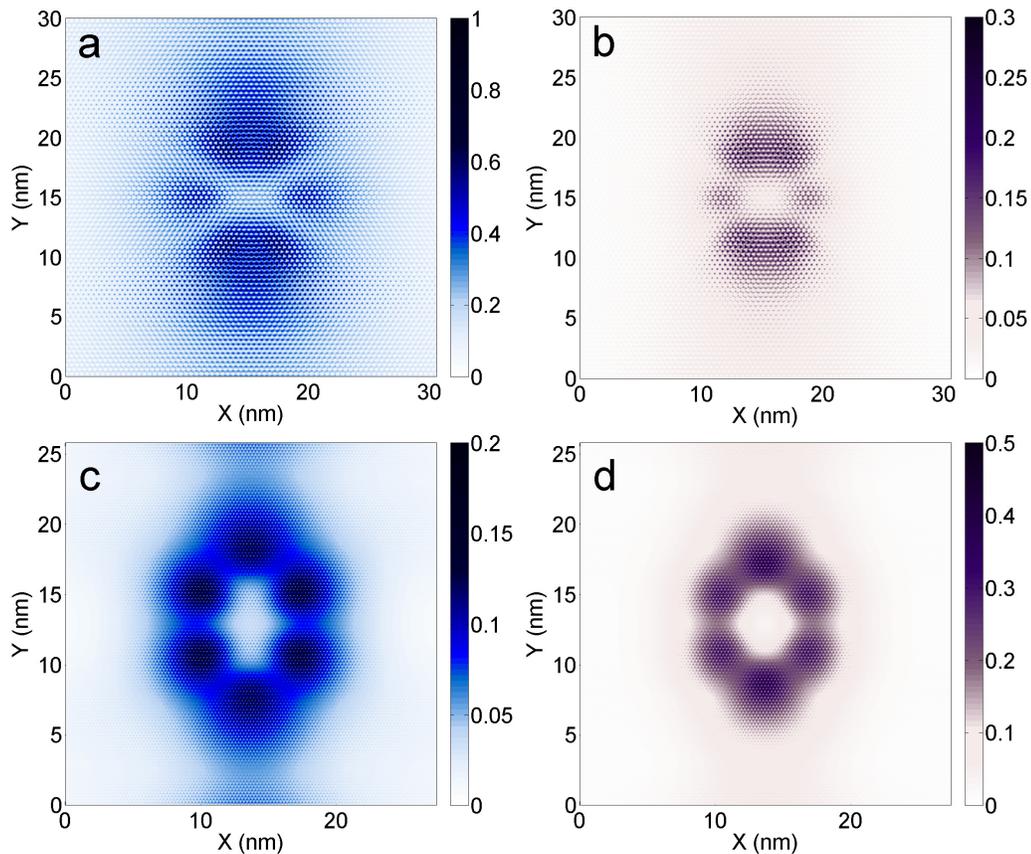


Figura 28. LDOS en presencia del potencial de deformación para energías correspondientes al mínimo en la conductancia (véase el acercamiento en la Fig.27). AGNR: a) $E = 0.119$ eV y $g = 0$, b) $E = 0.098$ eV y $g = -3$ eV. ZGNR: c) $E = 0.159$ eV y $g = 0$, d) $E = 0.124$ eV y $g = -3$ eV. Los otros parámetros del sistemas son iguales a aquellos de la Fig.27.

Para entender las influencia del potencial de deformación en la LDOS, primero estudiamos los cambios en la LDOS a energías asociadas a los mínimos de la conductancia. La Fig. 28 muestra la dependencia espacial de la LDOS para cintas *armchair* y *zigzag* en presencia de una deformación gaussiana, con (panel izquierdo) y sin (panel derecho) el potencial de deformación. Como se anticipaba, la dependencia angular de la distribución de la región de mayor concentración de estados (flor) no se ve modificada por el potencial de deformación. Sin embargo, la estructura tiene una dimensión radial menor. Ello indica que la estructura aumenta el confinamiento conforme se aumenta la constante de acoplamiento en el potencial de deformación.

Finalmente, el potencial de deformación no modifica la existencia de asimetría de subred o polarización de pseudo-espín. Esto se ejemplifica para cintas *armchair* (AGNR) en la Fig. 29. El panel a) muestra resultados para la LDOS a energía $E = 0.1$ eV con $g = 0.0$

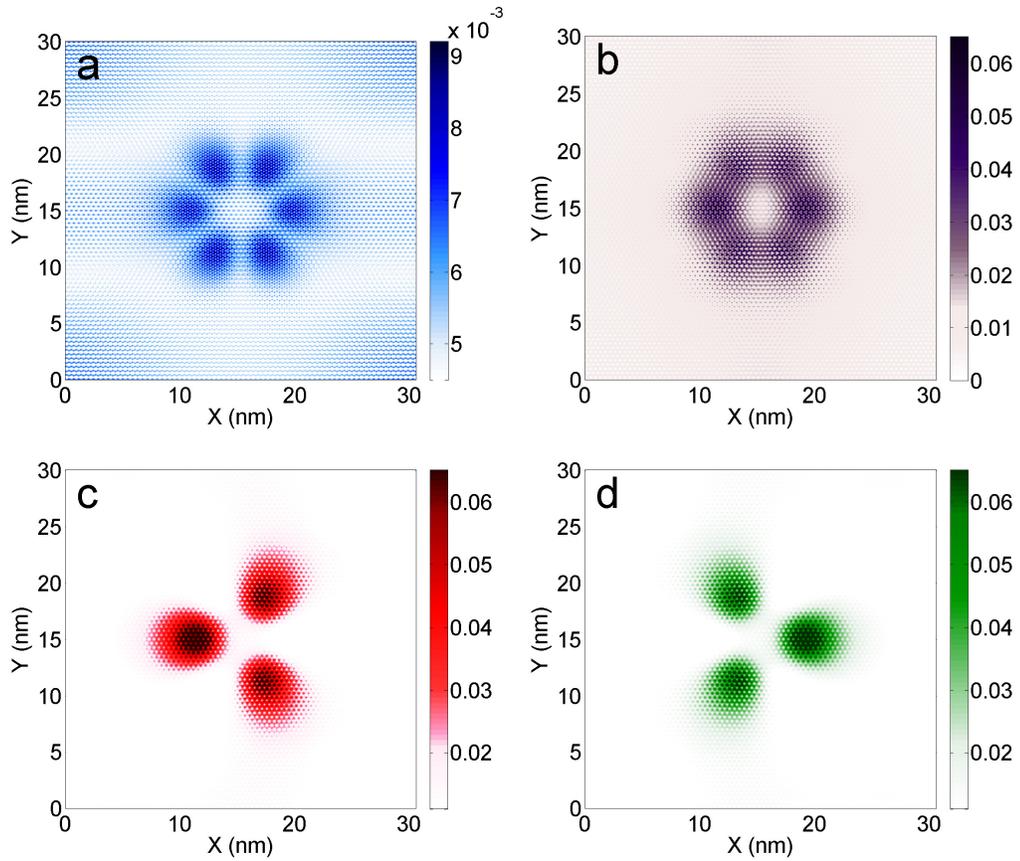


Figura 29. Efecto del potencial de deformación en la LDOS para AGNR a energía fija $E = 0.1$ eV con a) $g = 0$ y b) $g = -3.0$ eV. Los paneles c) y d) muestran la LDOS por subred con $g = -3.0$ eV. Los otros parámetros del sistema corresponden a los de la Fig.27.

eV, mientras el panel b) corresponde a $g = -3.0$ eV. Es claro de estas figuras que el único efecto apreciable del potencial de deformación es reducir la zona de alta concentración de estados en la dirección radial. Más aún, los paneles c) y d) proveen evidencia de que el potencial de deformación no solo preserva la estructura de flor sino que también preserva la asimetría de subred o polarización de pseudo-espín. Resultados similares se encontraron para cintas *zigzag*, pero no se muestran en este texto.

5.3.3 El efecto del campo magnético

La Fig. 30a muestra la conductancia como función de la energía de Fermi para diferentes magnitudes del campo magnético perpendicular, \mathbf{B} , en una nanocinta con bordes zigzag (ZGNR) de 244 sitios de ancho, equivalente a $W = 25.8$ nm y 224 sitios de largo, equivalente a una longitud de $L = 27.4$ nm. El campo magnético constante solo está presente en esta región rectangular, formando una barrera magnética rectangular para los electrones provenientes de los contactos. La línea negra discontinua, la conductancia en ausencia de campo magnético, es directamente proporcional al número de sub-bandas disponibles a la energía E . En presencia de campo magnético, los escalones aparecen redondeados y presentan oscilaciones. Ambas características están asociadas con efectos de interferencia por la definición de una barrera magnética y se conocen como oscilaciones de Fabry-Pérot. Si en vez de definir una función escalón, definiendo una región con campo cero y otra con campo finito, se incrementa suavemente el campo, estas oscilaciones desaparecen (Xu *et al.*, 2008). Además de provocar las oscilaciones, el campo magnético desplaza los escalones en las gráficas a la derecha. Ellos se debe a que conforme se aumenta el campo magnético, las bandas se desocupan y así decrece el número de estados disponibles a esa energía. Esto se debe a que el campo magnético proporciona un confinamiento adicional al producido por las condiciones de frontera.

El p nel Fig. 30b muestra la densidad total de estados como funci n de la energ a de Fermi para un campo magn tico de $B = 10T$ junto con la conductancia. Cada escal n en la conductancia se refleja en la densidad de estados como un pico asim trico. La magnitud del campo magn tico solo cambia la posici n de los picos, movi ndolos a energ as superiores. Los p neles Fig. 30c-d, muestran la densidad local de estados (LDOS) a energ a, $E = 0.14$ eV –marcada con una l nea vertical discontinua gris, para $B = 00$ T, $B = 10$ T, $B = 20$ T, $B = 30$ T respectivamente. Cuando no existe campo magn tico (p nel a), la densidad de estados se concentra en el centro para cumplir las condiciones de fronteras r gidas que definen la nanocinta. El panel d muestra el caso para campo magn tico $B = 10$, en  l se puede observar una acumulaci n de estados en la regi n central, creando un confinamiento. Cuando el campo

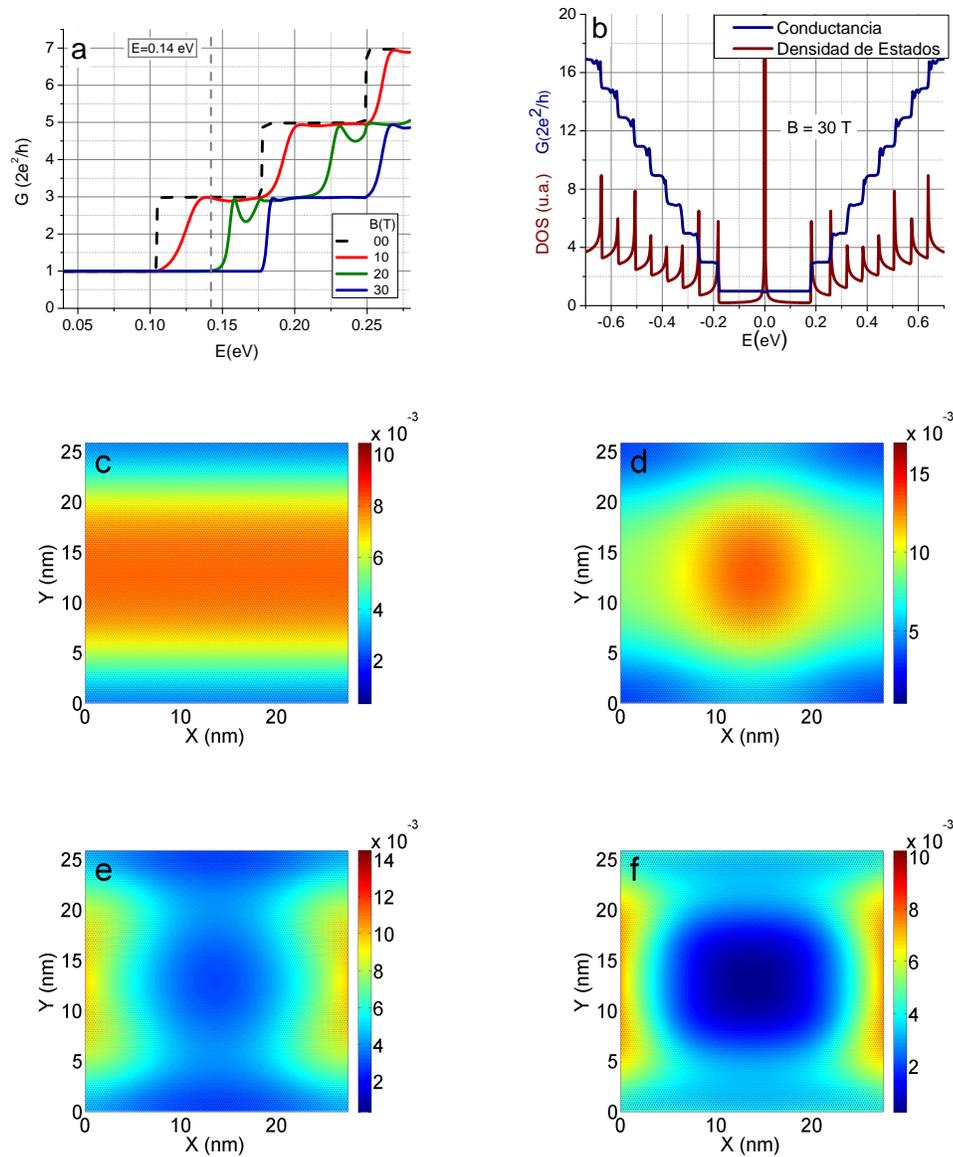


Figura 30. Conductancia y densidad de estados para una nanocinta con bordes zigzag (ZGNR) de longitud, $L = 27.4$ nm, y ancho, $W = 25.8$ nm en presencia de campo magnético. El panel a) muestra la conductancia, G , como función de la energía de Fermi, E , para diferentes valores del campo magnético. En panel b) se exhibe la densidad total de estados junto con la conductancia para $B = 10$ T. Los paneles c), d), e) y f) muestran la densidad local de estados a energía, $E = 0.14$ eV, y campo magnético $B = 0$ T, $B = 10$ T, $B = 20$ T y $B = 30$ T, respectivamente.

magnético aumenta, a esta energía esta región se vacía de estados (véanse paneles e-f), ello se refleja en la conductancia como el corrimiento del primer escalón hacia la derecha. La dependencia de la conductancia, en particular el hecho de que el modo (escalón) cero no se ve modificado por el campo magnético, sugiere que no se puede lograr un confinamiento total como en el caso de hojas de grafeno De Martino *et al.* (2007). Lo mismo sucede en el caso de armchair metálico y en el caso de AGNR semiconductoras el primer escalón (que llamamos escalón cero) no se mueve en energía como los superiores.

5.3.4 Transporte con campo magnético y deformaciones

Cuando se considera una deformación gaussiana y un campo magnético en la región rectangular, se combinan los efectos de ambos potenciales de norma. La Fig.31 muestra curvas de la conductancia en una ZGNR con una deformación gaussiana de amplitud $A = 1.42$ nm y ancho $b = 4.26$ nm y diferentes valores del campo magnético. La curva negra discontinua corresponde a la conductancia en ausencia de deformación y campo externo. La curva negra continua muestra la conductancia con deformación pero sin campo magnético externo. El efecto combinado de ambos potenciales produce el corrimiento de las curvas hacia a la derecha a medida que aumenta el campo magnético. Las oscilaciones de las curvas son producto de las oscilaciones de Fabry-Perót junto con los efectos de hibridización de sub-bandas producto de la deformación.

La línea vertical púrpura de la Fig. 31 indica la energía para la cual se grafica la LDOS en Fig. 32. En los paneles de esta figura se muestra que la combinación de ambos potenciales de norma. El campo magnético confina los estados en la región central y la deformación forma el patrón en forma de flor con simetría de 60 grados (véanse los paneles 32a-b). Cuando el campo magnético aumenta la región central se despuebla de estados y solo queda un remanente de la estructura de flor. El confinamiento magnético compite con el confinamiento producido por la deformación resultando en la desaparición de estados confinados en el interior de la cinta para altos valores de B .

Los paneles a,b y c de la Fig. 33 muestran la LDOS para la subred A, LDOS para la subred B y la polarización de subred local de una ZGNR. Se puede observar que la polarización de subred persiste aún en presencia de campo magnético para valores moderados de B .

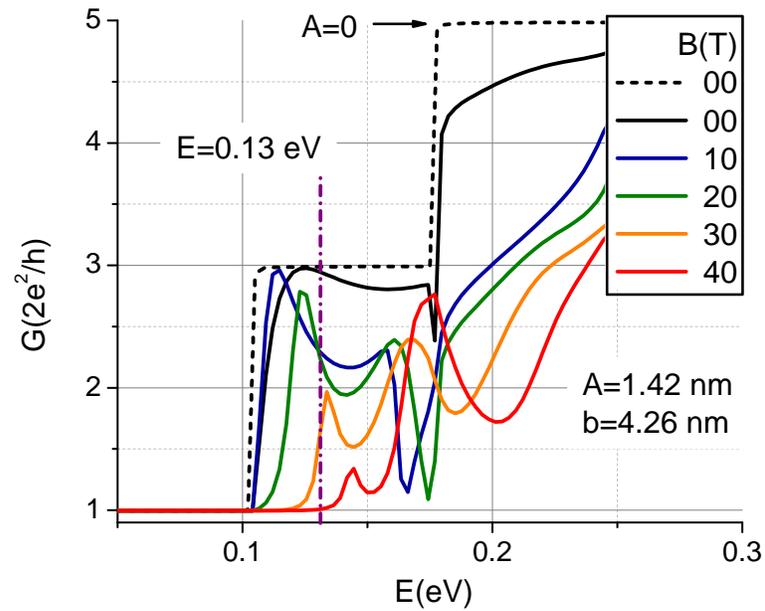


Figura 31. Conductancia, G , como función de la energía de Fermi, E , para una nanocinta con bordes *zigzag* (ZGNR) de longitud, $L = 27.4$ nm, y ancho, $W = 25.8$ nm con una deformación gaussiana de amplitud, $A = 1.42$ nm, y ancho, $b = 4.3$ nm, y diferentes valores del campo magnético, B . La curva negra discontinua muestra la conductancia en ausencia de campo magnético externo y deformación

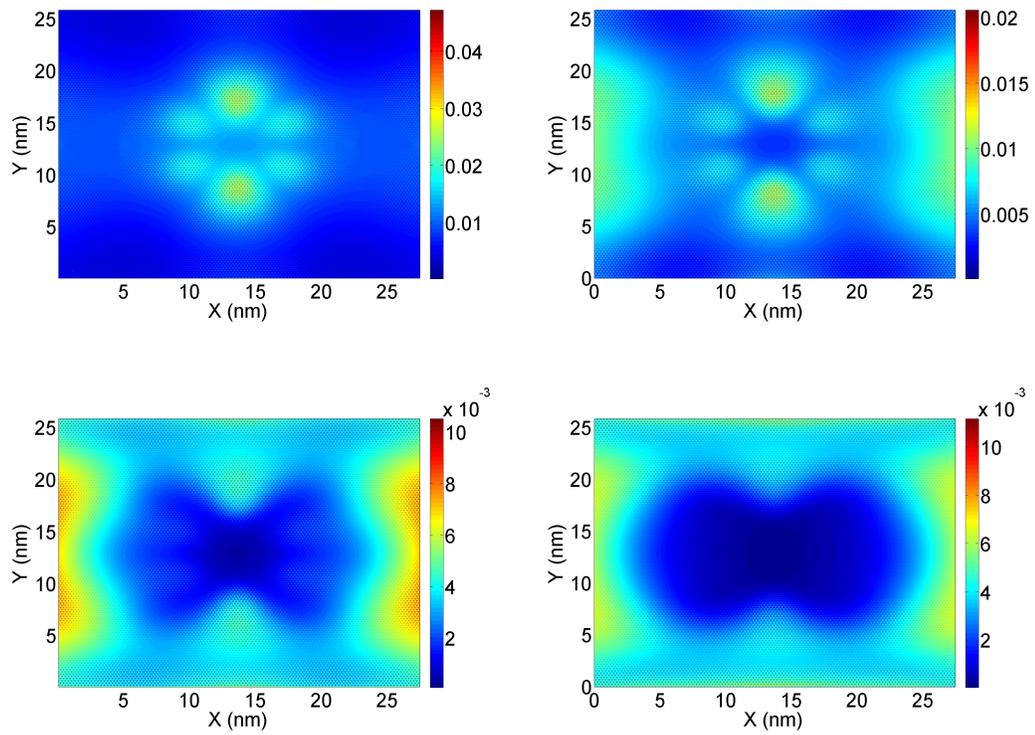


Figura 32. Mapas de la densidad local de estados a energía de Fermi, $E = 0.13$ eV, para una nanocinta con bordes zigzag (ZGNR) de longitud, $L = 27.4$ nm, y ancho, $W = 25.8$ nm con una deformación gaussiana de amplitud, $A = 1.42$ nm, y ancho, $b = 4.3$ nm, y diferentes valores del campo magnético, $B = 0$ T (panel a), $B = 10$ T (panel b), $B = 20$ T (panel c), $B = 30$ T (panel d).

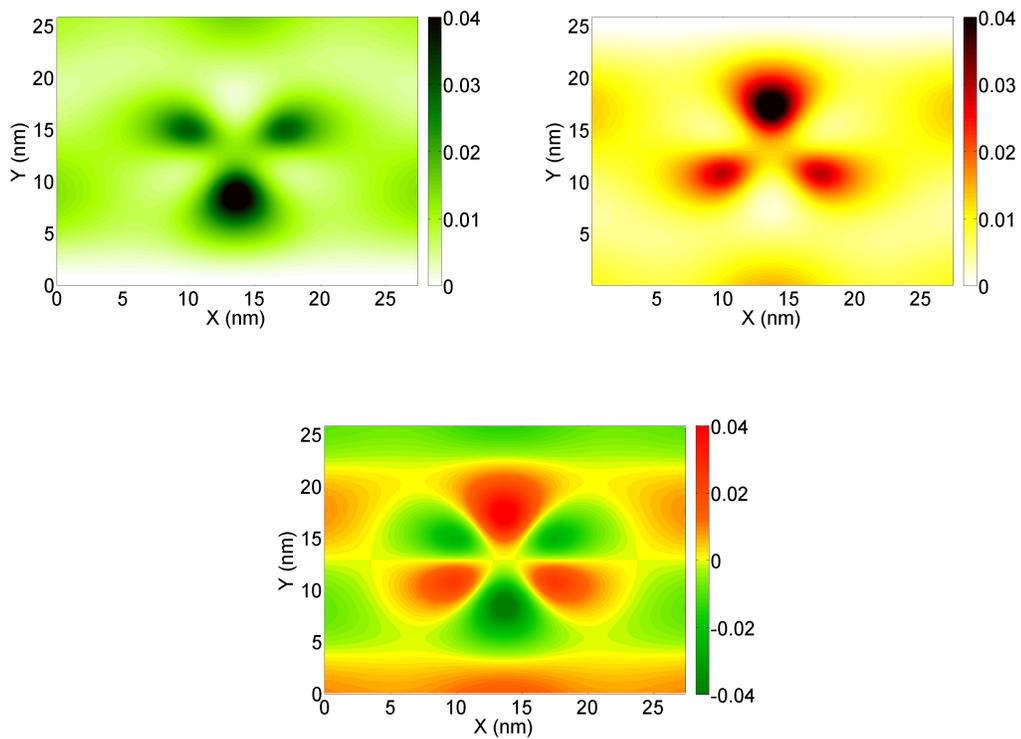


Figura 33. Distribución espacial de la densidad local de estados a energía de Fermi, $E = 0.13$ eV para la subred A (panel a) y B (panel b), para una nanocinta con bordes *zigzag* (ZGNR) de longitud, $L = 27.4$ nm, y ancho, $W = 25.8$ nm con una deformación gaussiana de amplitud, $A = 1.42$ nm, y ancho, $b = 4.3$ nm, y campo magnético, $B = 10$ T. El panel c muestra la resta de ambas figuras, la polarización de pseudo-espín.

Capítulo 6

Bombeo cuántico en nanocintas de grafeno

En este capítulo se describen los resultados obtenidos de estudiar el bombeo cuántico en sistemas unidimensionales y en nanocintas de grafeno. Los resultados que se muestran han sido publicados anteriormente en la literatura, en particular los asociados con nanocintas en grafeno forman parte de un trabajo en el que el autor es colaborador. En la sección 6.1 se hace una revisión de la literatura relevante a nuestro trabajo. Ésta no pretende ser una revisión exhaustiva, principalmente por la gran cantidad de trabajos en el tema y porque dicho propósito escapa de los objetivos del presente trabajo de tesis. En la sección 6.2.1 se presentan los detalles del modelo aunque el formalismo se describe detalladamente en el capítulo 2.

6.1 Bombas cuánticas

La mecánica cuántica de sistemas descritos por hamiltonianos dependientes del tiempo genera una variedad de fenómenos que no son accesibles dentro de los sistemas estacionarios (Grifoni y Hänggi, 1998). El desarrollo tecnológico, principalmente de láseres y máseres, ha hecho que este tipo de fenomenologías sean cada vez más accesibles experimentalmente; motivando estudios, teóricos y experimentales, creando así un amplio campo de estudio. En el presente trabajo, estamos interesados en las llamadas bombas cuánticas. Una bomba cuántica es un dispositivo que genera corriente rectificada entre dos electrodos que se mantienen al mismo potencial (Brouwer, 1998).

El origen del estudio de las bombas cuánticas se puede rastrear hasta el trabajo precursor de Thouless (1983). Él se preguntó si la carga que se transmite de un lugar a otro, producto de la variación adiabática de un potencial, está cuantizada. Estudiando la ec. de Schrödinger encontró que en el caso particular de sistemas periódicos infinitos, sin fronteras rígidas en al menos una dirección espacial, sí se genera una cuantización de la carga bombeada. En trabajos posteriores extendió el estudio considerando interacciones electrón-electrón con teoría de perturbaciones (Niu y Thouless, 1984). A partir de entonces, diferentes grupos se abocaron a la aplicación de estas ideas a otros sistemas como los arreglos Hall (Laughlin, 1981).

La primera realización experimental de la idea propuesta por Thouless fue la de Kouwenhoven *et al.* (1991), que consiste en un punto cuántico conectado a reservorios. Este dispositivo produce corriente rectificadora con dependencia escalonada en el tiempo, producto del bloqueo coulombiano (explicado en detalle más abajo), y que se genera a través de barreras con potencial oscilante en el tiempo. Si bien existe una diferencia de potencial entre los contactos, la variación de la corriente depende de la variación en la amplitud del potencial en las barreras. El funcionamiento de este dispositivo se ilustra en el diagrama de la Fig. 34. En los paneles se muestran diferentes instantes del ciclo en los que se bombea carga de un reservorio al otro. Nótese que los reservorios, representados por zonas sombreadas, se encuentran a diferentes potenciales químicos. La región central representa el punto cuántico con niveles de energía discretos. En el panel (a) se muestra el estado inicial: ambas barreras se encuentran a la misma altura (en energía), el estado N -ésimo está ocupado mientras el $N + 1$ está desocupado. La barrera de la izquierda empieza a bajar mientras la derecha aumenta, hasta llegar a la situación mostrada en el panel (b). Esta configuración hace más probable que un electrón del reservorio de la izquierda ocupe el estado $N + 1$. El hecho de que sea mucho más probable que solo un estado se ocupe, se debe a que el siguiente estado y la doble ocupación implican un mayor coste energético, fenómeno que se conoce como bloqueo coulombiano. Posteriormente, la barrera de la izquierda aumenta y la derecha disminuye pasando por el instante plasmado en el panel (c), donde ambas barreras están al mismo nivel y el nivel $N + 1$ ocupado, hasta llegar a la configuración (d). Al final del ciclo, se ha producido el bombeo de un electrón desde un reservorio al otro.

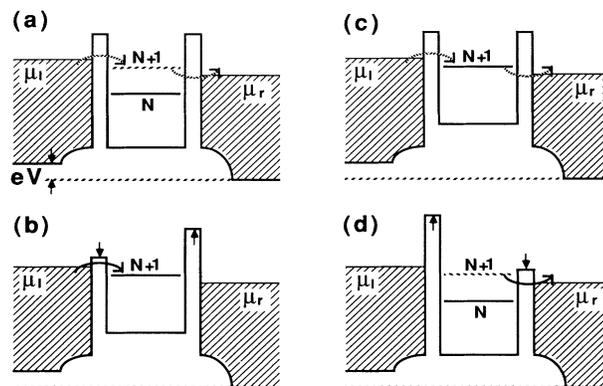


Figura 34. Diagrama del funcionamiento del dispositivo de bombeo de carga a través de un punto cuántico de Kouwenhoven *et al.* (1991). Los símbolos μ_l y μ_r son los potenciales electroquímicos de los reservorios izquierdo y derecho, respectivamente. El nivel de energía N indica la energía del N -ésimo electrón. Los paneles a-d son las cuatro fases del ciclo en el cual la probabilidad de tunear de un electrón es mayor si la barrera está abajo y menor si la barrera está arriba.

Al de Kouwenhoven, le siguieron otros arreglos experimentales como el de Pothier *et al.* (1992), que operan en baja frecuencia y con dirección de bombeo reversible. La mayoría de

estos arreglos, que funcionan como bombas cuánticas, hacen uso del bloqueo coulombiano, obteniendo de esta manera cuantización en la corriente proveniente de la naturaleza discreta de los niveles del sistema central (punto cuántico, doble punto cuántico, etc).

El mecanismo de la propuesta teórica de Spivak *et al.* (1995), aunque similar ya que se trata de un punto cuántico conectado a reservorios, representó un cambio de paradigma pues no implicaba el bloqueo coulombiano sino solo la variación adiabática de dos parámetros del sistema que pueden ser los voltajes que definen la estructura (como en los puntos cuánticos), el campo magnético o a la energía de Fermi. A esta forma de crear una corriente de bombeo se le conoce como bombeo paramétrico.

Basándose en la propuesta de Spivak *et al.*, Brouwer (1998) desarrolló un formalismo que utiliza la matriz de dispersión. Aplicando los resultados de Buttiker (1993) se puede encontrar la corriente de bombeo en la aproximación adiabática y a orden lineal en la frecuencia de oscilación de los parámetros. Esta fórmula es una generalización de la fórmula de Landauer (Datta, 1995), que relaciona la conductancia con los elementos de la matriz de dispersión.

Una gran cantidad de trabajos aplicaron (y siguen aplicando) la elegante formulación de Brouwer para explorar el bombeo cuántico en diversos sistemas (véase la tesis de Kashcheyevs (2006)). Este enfoque lleva de manera natural a la descripción geométrica del bombeo cuántico (Avron *et al.*, 2002), en la que se mostró que, en un sistema abierto general, la carga bombeada no está cuantizada (Levitov, 2001) y es proporcional al área del espacio fase que encierra el ciclo de la variación de los parámetros (Moskalets y Büttiker, 2001).

Se han desarrollado diversas generalizaciones al bombeo cuántico, en particular la serie de artículos de Moskalets y Büttiker generalizaron estos resultado para el régimen no adiabático y exploraron las diferencias entre ambos regímenes (Moskalets y Büttiker, 2001, 2002a,b, 2004a,b, 2007). Otro tipo de generalización es la inclusión de interacciones (para una revisión extensa, véase Kashcheyevs 2006).

Los resultados experimentales de Switkes *et al.* (1999) mostraron el bombeo cuántico en sistemas mesoscópicos en los que los reservorios se encuentran al mismo potencial químico. En este sistema, la variación de los potenciales de conexión con los reservorios genera corriente directa. Esta realización se consideró un ejemplo inequívoco de una bomba cuántica. Sin embargo, entre los resultados que presentaron, llamó la atención la dependencia anómala (simétrica) de la corriente de bombeo con el campo magnético. La simetría frente a la inversión del campo magnético es una propiedad de la conductancia en sistemas mesoscópicos. En contraste, la corriente de bombeo depende de las amplitudes de dispersión y por tanto

no posee simetría respecto a la inversión del campo (Shutenko *et al.*, 2000; Aleiner *et al.*, 2000). El consenso actual para la interpretación de estos resultados, señala que el bombeo cuántico en tal experimento, si es que existe, se ve encubierto por la corriente rectificadora —que es simétrica con respecto a la inversión de campo magnético (Benjamin, 2006).

Como el fenómeno de bombeo cuántico usualmente involucra una dependencia temporal armónica, la manera natural para tratarlo es el formalismo de Floquet. Este permite escribir la Ec. de Schrödinger dependiente del tiempo como una ecuación estacionaria. Este formalismo permite aplicar los resultados de la teoría de la matriz de dispersión a problemas con dependencia temporal periódica (véase Moskalets y Büttiker 2002a). Un enfoque alternativo es el propuesto por Vavilov *et al.* (2001) que trabaja en el espacio fase en vez del espacio paramétrico utilizando el tiempo explícitamente en vez del desarrollo del Floquet.

El formalismo de Keldysh es otra herramienta teórica para investigar fenómenos dependientes del tiempo. Este ha sido aplicado en el transporte electrónico (Pastawski, 1992; Jauho *et al.*, 1994) y en particular puede ser aplicado al estudio de la corriente de bombeo en sistemas mesoscópicos. López *et al.* (1998, 2001) lo utilizaron para estudiar el transporte bajo potenciales alternantes en un punto cuántico y posteriormente en superestructuras (López *et al.*, 2003); por su parte Cuevas *et al.* (2002) lo aplicó en juntas Josephson y Wang *et al.* (2002) a bombas cuánticas.

Arrachea (2002) desarrolló una formulación práctica del formalismo de Keldysh y la aplicó al estudio del transporte dependiente del tiempo a través de un anillo mesoscópico atravesado por un flujo magnético. El formalismo de la matriz de dispersión (o de Floquet) es intrínsecamente para una sola partícula, por lo que no puede ser directamente aplicado a sistemas con interacciones de muchos cuerpos (Arrachea y Moskalets, 2006). En contraste, el formalismo de Keldysh ofrece una manera sistemática de introducir las interacciones. No obstante, el formalismo de Keldysh es también adecuado para sistemas sin interacciones, principalmente por la disponibilidad de métodos para su implementación numérica.

Los trabajos mencionados anteriormente consideran relaciones de dispersión semiconductoras (cuadráticas y con *gap*). El grafeno presenta la oportunidad de estudiar los efectos de bombeo y cuantización de carga en sistemas descritos por fermiones de Dirac. El primer trabajo reportado fue el de Prada *et al.* (2009), donde estudió un dispositivo de dos terminales (a un mismo potencial químico) conectado a través de barreras con potencial oscilante en el tiempo. Modelaron el grafeno en la aproximación de Dirac y aplicaron la fórmula de Brouwer para obtener la corriente de bombeo. Sus resultados muestran que en el caso de grafeno, los modos evanescentes juegan un rol fundamental —debido al tuneo de Klein— y dominan el

bombeo cerca del punto de Dirac. Un estudio similar fue el de Zhu y Chen (2009).

La formulación general del bombeo paramétrico mostró implícitamente la capacidad de obtener la corriente de bombeo variando el campo magnético (Brouwer, 1998). El estudio de Benjamin y Benjamin (2004) caracterizó la corriente de bombeo asistida por la variación de campo magnético. Este resultado tiene relevancia particular en el caso de grafeno pues, a diferencia de las barreras de potencial, las barreras magnéticas pueden causar confinamiento electrónico (De Martino *et al.*, 2007; Xu *et al.*, 2008) y proveen una manera de evitar el tuneo de Klein. Un estudio con barreras magnéticas dependientes del tiempo en grafeno no ha sido reportado aún. Sin embargo, se ha estudiado la corriente de bombeo a través de barreras magnéticas estáticas creada por la variación de barreras de potencial (Grichuk y Manykin, 2013; Jellal *et al.*, 2014). Ambos estudios se realizaron en la aproximación de Dirac para describir el grafeno y en el régimen de la aproximación adiabática para describir la dependencia temporal.

Una manera alternativa de lograr confinamiento en grafeno, y sobrepasar el fenómeno del tuneo Klein, son las deformaciones. En grafeno, las deformaciones pueden expresarse como pseudo-campos magnéticos en la aproximación de Dirac (Castro Neto *et al.*, 2009). Incluso se ha señalado que pueden dar lugar a la formación de niveles de Landau. Benjamin (2013) estudió el bombeo cuántico causado por barreras de potencial oscilantes en el tiempo a través de una región de grafeno con deformación uniaxial en el plano, en la aproximación de Dirac y con la fórmula de Brouwer. Sus resultado señalan que las deformaciones pueden servir para distinguir entre la corriente de bombeo y la corriente rectificada en dispositivos de grafeno.

Se puede decir que gran parte de los trabajos que estudiaron la corriente de bombeo en sistemas basados en grafeno se realizaron en la aproximación adiabática, con la matriz de dispersión y describiendo el grafeno en la aproximación de Dirac. Sin embargo, en el caso de nanocintas de grafeno la descripción atomística en la aproximación de amarre fuerte es la más adecuada para describir los efectos de las fronteras rígidas (Lewenkopf y Mucciolo, 2013), discordancia entre redes (Robinson y Schomerus, 2007) los efectos de campos magnéticos (Xu *et al.*, 2008), así como las deformaciones (Barraza-Lopez *et al.*, 2013). De esta manera el estudio del bombeo cuántico, fuera del régimen adiabático y describiendo atomísticamente el grafeno en aproximación de amarre fuerte, es de interés no solo académico sino también tecnológico. En la siguiente sección se describen los resultados del estudio del bombeo cuántico en grafeno. Se presentan resultados para dos sistemas: una cadena unidimensional de sitios y una nanocinta de grafeno. En el caso unidimensional los resultados son una prueba de que nuestra implementación por columnas (descrita en el capítulo 2) funciona correctamente.

Además nos permite presentar la fenomenología del bombeo cuántico, las cantidades físicas de interés y contrastar con los resultados en el caso de nanocintas de grafeno. Los resultados para el bombeo cuántico en nanocintas grafeno son preliminares y sientan las bases para estudios posteriores como el bombeo mecánico, a través de barreras magnéticas y de deformaciones.

6.2 Bombeo en cadena unidimensional

6.2.1 Modelo

Considere el sistema de la Fig. 35, una cadena unidimensional de L sitios (átomos, puntos cuánticos, etc.) conectada en sus extremos (sitios 1 y L) a reservorios de electrones –que modelamos como cadenas semifinitas de sitios. La energía W_0 caracteriza el tuneo entre los reservorios y la región central. Ambos reservorios, etiquetados como I y D , se encuentran a potencial químico μ . consideramos la energía de sitio cero en todos los sitios excepto en el primer y último sitio, donde se considera un potencial, E_b , constante y un potencial armónicamente dependiente del tiempo de amplitud V_0 , frecuencia Ω y fase relativa Δ . Así sin considerar la dependencia temporal, el perfil del potencial de doble barrera define un confinamiento simétrico. Sin embargo, la aplicación de un potencial armónico rompe la simetría de inversión espacial.

El hamiltoniano de la región central se puede escribir como sigue,

$$H_c = \sum_{n=1}^{L-1} \varepsilon_n c_n^\dagger c_n - t_0 \sum_{n=1}^{L-1} (c_n^\dagger c_{n+1} + H.c.) \quad (220)$$

$$+ W_0 \left(c_{0_I}^\dagger c_1 + c_L^\dagger c_{(L+1)_D} + H.c. \right) + V \cos(\omega t) \left(c_1^\dagger c_1 + c_L^\dagger c_L \right), \quad (221)$$

donde el primer término es la energía de sitio, con $\varepsilon_1 = \varepsilon_L = E_b$ y $\varepsilon_n = 0$ para $n = 2, \dots, L-1$, definiendo una estructura de doble barrera. El segundo término es la energía asociada al tuneo entre sitios vecinos inmediatos, con, t_0 , la constante de tuneo. Las etiquetas 0_I y $(L+1)_D$ refieren al último sitio del contacto izquierdo y el primero del contacto derecho, respectivamente. El tercer término acopla la región central con los contactos, con W_0 como parámetro de tuneo. El último término representa el potencial armónico de amplitud V frecuencia Ω y fase relativa Δ en los sitios 1 y L .

Nos interesa calcular la corriente rectificada de bombeo del sitio 1 al sitio L . Para esto, evaluamos numéricamente las expresiones 167, 168, 170, 171, 172 y 173; obtenidas de ree-

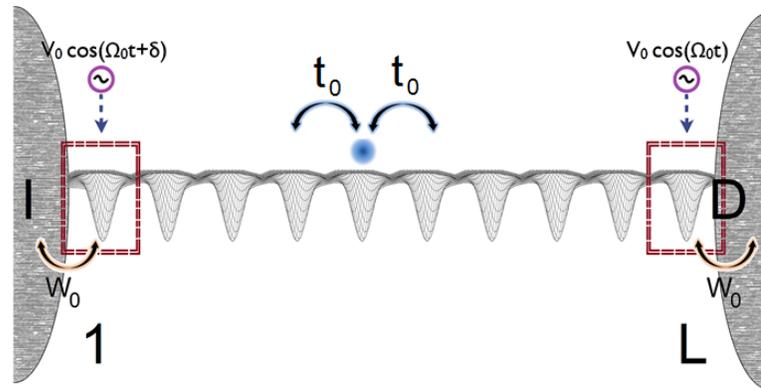


Figura 35. Diagrama del sistema físico. Una cadena unidimensional, de L sitios, conectada a reservorios infinitos en sus extremos. En el primer y último sitio se aplica un potencial armónico en el tiempo de amplitud V_0 , frecuencia Ω y fase relativa Δ . La conexión con los reservorios está mediada a través de la amplitud de tuneleo W_0 . t_0 es la amplitud de tuneleo entre los sitios de la cadena unidimensional.

scribir –usando la ec. de Dyson– los resultados del método de renormalización de Arrachea (Arrachea, 2002, 2004, 2005; Arrachea y Moskalets, 2006; Arrachea, 2007) usando el formalismo de Keldysh (Jauho *et al.*, 1994). En este caso particular, las expresiones se simplifican por la dimensionalidad del sistema: las matrices se reducen a números complejos.

6.2.2 Resultados y discusiones

La Fig. 36 muestra la corriente rectificada de bombeo, J , a través de una cadena unidimensional, de longitud $L = 20$ sitios, como función del potencial químico en los reservorios (o contactos), μ . Los paneles superior e inferior son para diferentes valores de la constante de acoplamiento con los contactos, $|W_0|^2 = 0.1$ y $|W_0|^2 = 0.5$, respectivamente. En ambos casos, las curvas para diferentes valores de frecuencia de bombeo Ω , se muestran en diferentes colores. La curva negra es para frecuencia $\Omega = 0.01 t_0/\hbar$. En esta curva se observan picos consecutivos, cada uno de estos marca la energía de los estados dentro de la estructura de doble barrera. Cuando la frecuencia es baja en comparación con la diferencia de energía entre niveles, la energía que los potenciales dependientes del tiempo pueden ceder a los electrones es pequeña. De tal manera, la corriente de bombeo para esta frecuencia es cero a menos que el potencial químico esté cerca a un nivel de energía del sistema central. Entonces se forma un pico cuya anchura está asociada a la conexión con los contactos, por eso los picos son más anchos en el panel inferior que en el superior. Nótese, que la posición no depende de la conexión con los contactos –es la misma en ambos paneles. Las curvas de colores son para frecuencias más altas: rojo para $\Omega = 0.30 t_0/\hbar$, verde para $\Omega = 0.45 t_0/\hbar$ y azul para

$\Omega = 0.60 t_0/\hbar$. En el panel superior –en el que la conexión con los contactos es marginal, la curva muestra un comportamiento escalonado con los picos de la curva negra marcando el inicio de un nuevo escalón. En el panel inferior este comportamiento escalonado se suaviza. Este es un efecto de los contactos, que vía términos de autoenergía hacen un ensanchamiento de la antes posiciones discreta en energía de los estados en la región central. En todas las curvas es posible observar un cambio de signo (menos apreciable en la curva negra), el signo indica la dirección de la corriente. Determinar el signo de la corriente de bombeo es un problema que, fuera del régimen adiabático, no ha sido resuelto aún.

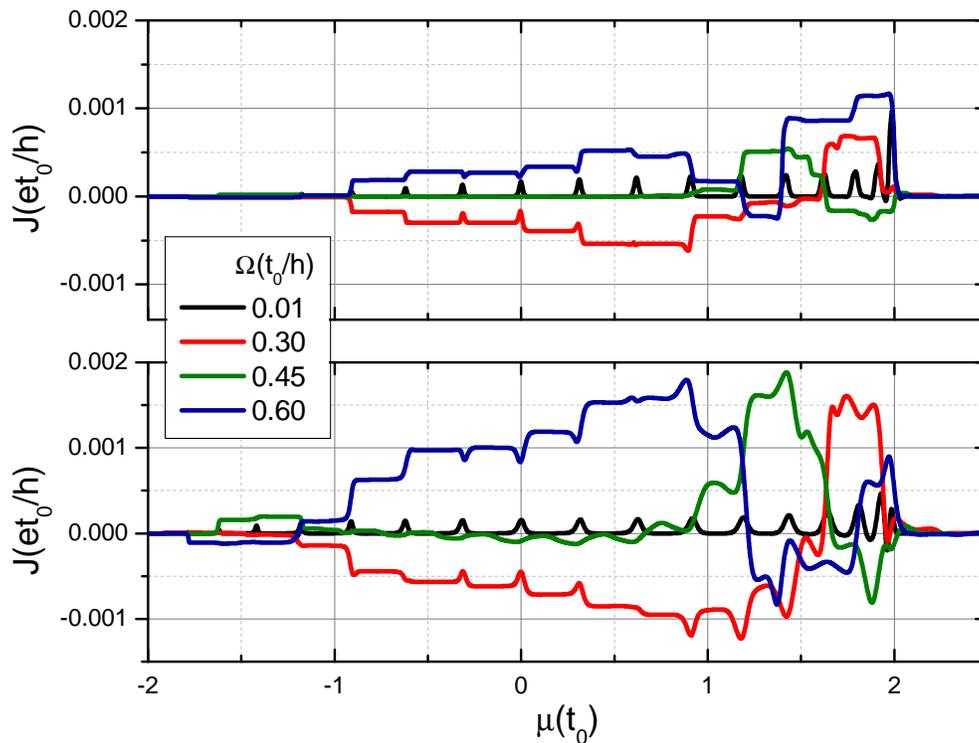


Figura 36. Corriente de bombeo rectificada, J_0 , como función del potencial químico de los reservorios. Los paneles superior e inferior corresponden a diferentes valores del acoplamiento con los contactos, $|W_0|^2 = 0.1$ y $|W_0|^2 = 0.5$, respectivamente. La amplitud de bombeo es $V_0 = 0.2$. Los diferentes colores de las curvas son para diferentes valores en la frecuencia de bombeo: la curva negra para $\Omega = 0.01$, rojo para $\Omega = 0.30$, verde para $\Omega = 0.45$ y azul para $\Omega = 0.60$. La fase entre los potenciales es medio periodo la energía de sitio del primer y último sitios es E_b , el ancho de banda de los contactos es $W = 4$ y el número de sitios es $L = 20$.

La Fig. 37 muestra la corriente de bombeo como función de la frecuencia del potencial armónico Ω , para diferentes valores del parámetro de acoplamiento con los contactos $|W_0|^2$. Los colores en las curvas corresponden a diferentes valores de este parámetro: azul para

$|W_0|^2 = 0.1$, naranja para $|W_0|^2 = 0.5$ y cian para $|W_0|^2 = 1.0$. Los p anes superior y inferior son para diferentes valores en la amplitud del potencial arm nico, $V = 0.2$ y $V = 1$, respectivamente. En ambos p anes, observamos el mismo comportamiento oscilatorio en el signo de la corriente, J y un aumento en la magnitud de esta oscilaci n conforme se aumenta la frecuencia, Ω . A mayor acoplamiento con los contactos, $|W_0|$, mayor es la amplitud de la oscilaci n en la corriente, J . Esto se debe a la dependencia de  sta con las matrices de hibridizaci n (v ase la Ec.151)

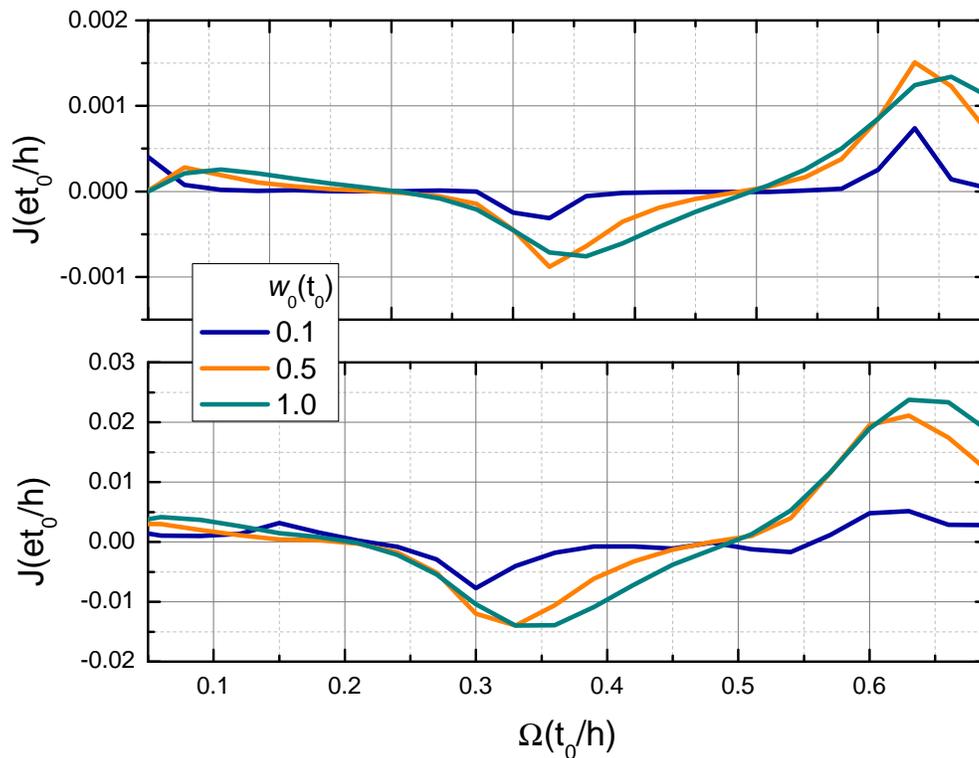


Figura 37. Corriente de bombeo rectificada como funci n de la frecuencia de bombeo, Ω , para diferentes valores del tunelamiento de acoplamiento con los contactos, w_0 . Los p anes superior e inferior muestran los resultados para amplitudes de la oscilaci n del potencial de bombeo, $V = 0.2$ y $V = 1$, respectivamente.

Resultados equivalentes a los presentados en Fig. 36 y Fig. 37 fueron publicados anteriormente por nuestra colaboradora, Liliana Arrachea (Arrachea, 2005). N tese que nuestros resultados fueron obtenidos utilizando la implementaci n por columnas, demostrando la validez del m todo propuesto en el cap tulo 2.

6.3 Bombeo en nanocintas de grafeno

6.3.1 Modelo

Estamos interesados en estudiar la corriente de bombeo a través del dispositivo esquematizado en la Fig. 38: Una nanocinta de grafeno conectada a reservorios de electrones (o contactos), modelados como cintas seminfinitas de red cuadrada. El cambio de red en los contactos es para modelar una situación cercana a los experimentos, donde los dispositivos se conectan con contactos ohmicos de un material distinto, oro por ejemplo. El parámetro de tuneo dentro de la región central es t_0 , dentro de los reservorios es t_r y entre los sitios de conexión entre la región central y los reservorios es W_0 . En la primera y última columnas de sitios de la región central se aplica un potencial de sitio constante E_0 y un potencial armónico en el tiempo con amplitud V_0 , frecuencia Ω_0 y fase relativa δ . El hamiltoniano de la región central es,

$$H_c(t) = -t_0 \sum_{\langle r,r' \rangle} (c_r^\dagger c_{r'} + h.c.) + \sum_{\alpha=I,D} \sum_{\langle r,r_\alpha \rangle} [E_0 + V_0 \cos(\Omega_0 t + \delta_\alpha)] c_r^\dagger c_r + W_0 \sum_{\langle r,r_\alpha \rangle} c_r^\dagger c_{r_\alpha}, \quad (222)$$

donde $c_r^\dagger(c_r)$ es el operador fermiónico de creación (aniquilación) en el sitio con etiqueta $\mathbf{r} = (x, y)$. La etiqueta α es para los contactos, así los sitios r_α son aquellos que están en el reservorio α . Los corchetes $\langle \dots \rangle$ indican suma sobre los sitios vecinos inmediatos. De esta manera, el primer término refiere a la energía cinética dentro de la región central, el segundo a los potenciales aplicados en la primera y última columnas de la región central y el tercero es el acoplamiento con los contactos.

Usando el formalismo descrito en el capítulo 2, encontramos la conductancia en equilibrio –cuando $V_0 = 0$ – y la corriente de bombeo. Los resultados preliminares se presentan y discuten en la siguiente sección 6.3.2.

6.3.2 Resultados y discusiones

Antes de discutir los resultados para la corriente de bombeo, mostramos los resultados para la conductancia en equilibrio. La motivación es describir los efectos que se generan por el cambio de simetría: red cuadrada en los contactos y hexagonal en la región central. Estos

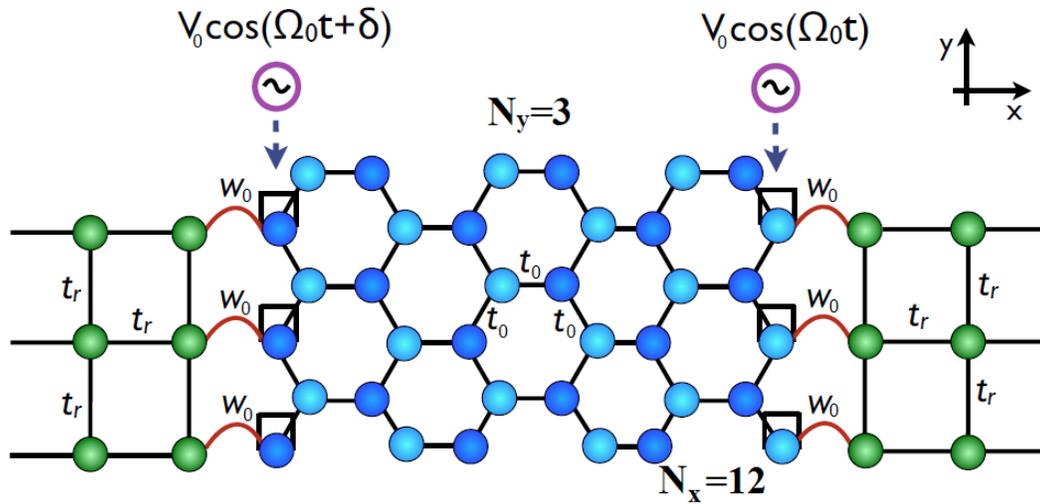


Figura 38. Diagrama del sistema físico. Una cinta de grafeno –red hexágona, de N_x sitios de longitud y N_y cadenas de ancho, conectada a reservorios infinitos de red cuadrada en sus extremos. En la primer y última columna de sitios se aplica un potencial armónico en el tiempo de amplitud V_0 , frecuencia Ω y fase relativa Δ . La conexión con los reservorios está mediada a través de la amplitud de tunelamiento W_0 . t_0 es la amplitud de tunelamiento entre los sitios dentro de la cinta de grafeno y t_r entre los sitios de los contactos.

efectos fueron descritos ampliamente por Robinson y Schomerus (2007), que muestran que un sistema como el estudiado en esta sección, puede exhibir comportamiento de aislante debido a la discordancia entre redes. La Fig. 39 muestra la conductancia como función del potencial químico en los contactos en diferentes sistemas. La curva negra continua es la conductancia para una nanocinta de red cuadrada con contactos de red cuadrada, en esta curva se muestran los escalones asociados a los estados transversales en la nanocinta. De manera similar en la curva azul se muestra la conductancia para una nanocinta de grafeno conectada a contactos de grafeno con los escalones asociados a los estado transversales. La diferencia entre el panel de la izquierda (a) y el panel de la derecha (b) es el número de cadenas de sitios (o sitios en la dirección transversal), así en el panel (a) vemos comportamiento semiconductor y en el de la derecha metálico, ya que este número determina el comportamiento de las nanocintas de grafeno. La curva roja continua es para una nanocinta de grafeno con contactos de red cuadrada, en este caso se observan muchas oscilaciones provenientes de la discordancia entre redes y efectos de interferencia tipo Fabry-Perot. Se sabe que al menos en el régimen adiabático la corriente de bombeo y la conductancia guardan relación, por tanto se espera que la corriente de bombeo muestre este tipo de oscilaciones. La asimetría ante inversión de signo en el potencial de los contactos, la llamada simetría de partícula-agujero, se debe a la discretización en el espectro de energía de los reservorios. Nótese que la curva azul sirve como cota superior para la curva roja.

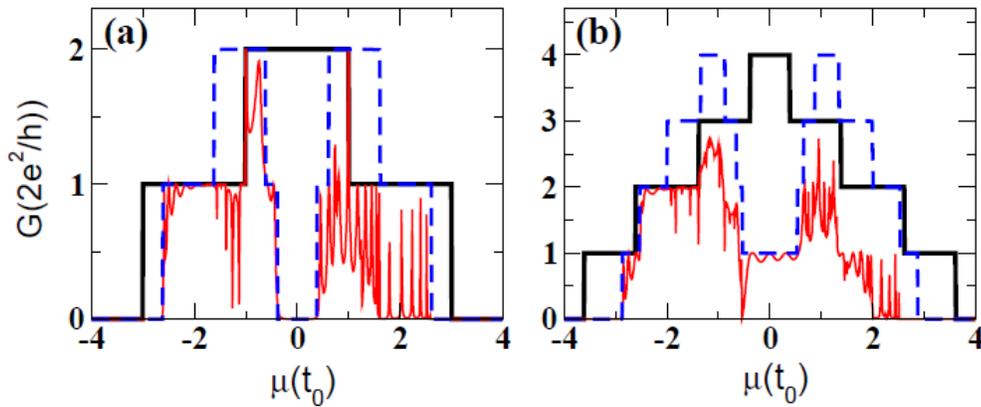


Figura 39. Conductancia, G , como función del potencial químico en los contactos, para una nanocinta con $N_x = 20$ y $N_y = 2$ en el panel (a) y $N_y = 3$ en el panel (b). La curva negra continua es la conductancia para una nanocinta de red cuadrada con contactos de red cuadrada, la curva azul discontinua es para una nanocinta de grafeno con contactos de grafeno y la curva roja continua es para una nanocinta de grafeno con contactos de red cuadrada.

La Fig. 40 muestra la corriente de bombeo como función del potencial químico en los contactos para diferentes valores de la frecuencia de bombeo en el dispositivo esquematizado en Fig. 38. Los resultados son para una nanocinta con $N_x = 20$ y $N_y = 2$ en el panel (a) y $N_y = 3$ en el panel (b). Las diferentes curvas son para diferentes valores de la frecuencia de bombeo: La curva negra es para $\Omega = 0.01$, roja discontinua para $\Omega = 0.3$, punteada azul para $\Omega = 0.45$ y continua azul para $\Omega = 0.6$. La naturaleza semiconductor o metálica de las nanocintas se refleja también en la corriente de bombeo. Se puede observar que en el panel (a) aparece una región cercana a cero donde la corriente es cero, mientras en el panel (b) es finita. De manera general, las curvas muestran un comportamiento similar a la curva de conductancia de Fig. 39. La curva negra, para frecuencia de bombeo en el régimen adiabático, muestra los picos asociados a los estados discretos en la región central. Las otras curvas, para frecuencias mayores, muestran oscilaciones más complejas que aumentan conforme aumenta la amplitud de oscilación.

En la Fig. 41 se grafica la corriente de bombeo como función de la frecuencia de bombeo, para una nanocinta con $N_x = 20$ y $N_y = 2$ en el panel (a) y $N_y = 3$ en el panel (b). En ambos paneles, la curva negra punteada es la corriente para potencial químico $\mu = 0$. En el panel (a) la corriente es cero dentro de este rango de frecuencias debido a la naturaleza semiconductor de la nanocinta, para la nanocinta metálica, panel (b), la corriente es diferente de cero. Las curvas azules son para potencial químico $\mu = -1 t_0$. A frecuencias bajas, $\Omega < 0.05$, el comportamiento de las curvas es aproximadamente lineal, esto concuerda con la predicción en el régimen adiabático. Cuando la frecuencia aumenta se presentan cambio de signo y

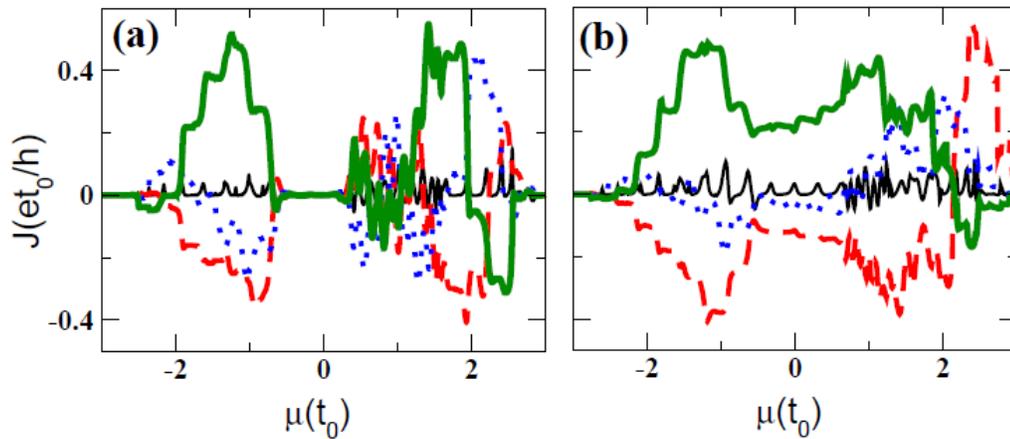


Figura 40. Corriente de bombeo rectificada, J , como función del potencial químico en los contactos, para una nanocinta con $N_x = 20$ y $N_y = 2$ en el panel (a) y $N_y = 3$ en el panel (b). Las diferentes curvas son para diferentes valores de la frecuencia de bombeo: La curva negra es para $\Omega = 0.01$, roja discontinua para $\Omega = 0.3$, punteada azul para $\Omega = 0.45$ y continua azul para $\Omega = 0.6$. (Figura tomada de Kaur (2013))

luego oscilaciones. Como en el caso unidimensional, la amplitud de las oscilaciones aumenta conforme se aumenta la frecuencia.

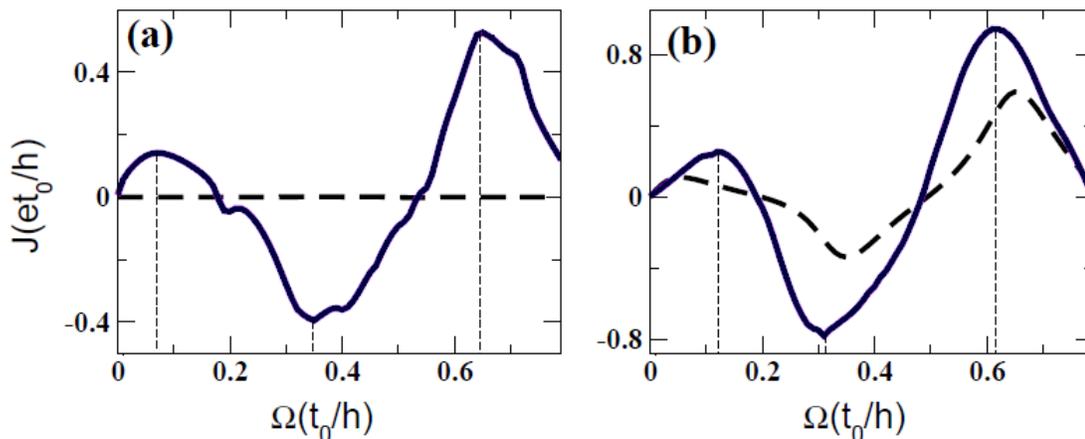


Figura 41. Corriente de bombeo rectificada, J , como función de la frecuencia de bombeo, Ω , para una nanocinta con $N_x = 20$ y $N_y = 2$ en el panel (a) y $N_y = 3$ en el panel (b). La curva negra discontinua es para potencial químico nulo y la curva azul para potencial químico finito. (Figura tomada de Kaur (2013))

Los resultados presentados son preliminares y forman parte de un estudio iniciado por nuestra colaboradora, Dra. Tejinder Kaur, y en el que estoy colaborando para completar. Ellos forman parte de un estudio de mayor alcance en el que pretendemos estudiar los efectos de la deformaciones y el campo magnético en la corriente de bombeo, de manera similar como hicimos con el transporte en equilibrio.

Capítulo 7

Conclusiones

Hemos presentado un estudio de la conductancia en nanocintas de grafeno, con terminaciones armchair y zigzag, en presencia de una deformación gaussiana central fuera del plano. La deformación causa un pseudo campo magnético inhomogeneo en el centro de la estructura. No se observan niveles de Landau disponibles para el transporte, más sí se observan estados ligados que se concentran en la región de la deformación. Presentamos una descripción espacial de la localización y las simetrías de estos estados ligados. Ellos muestran una ruptura local de la simetría de subred, misma que se asocia con el pseudo espín local en la aproximación de Dirac, y que alterna cada 60° . Estos resultados son independientes de la orientación cristalina del transporte (armchair o zigzag) y están dentro de los alcances experimentales actuales.

Se estudió el transporte electrónico en nanocintas de grafeno a través de barreras magnéticas, obteniendo resultados que concuerdan con la literatura especializada. Además, se consideró el caso en que dentro de la barrera magnética se dispone una deformación gaussiana central y fuera del plano. Los resultados tanto en la conductancia como la densidad de estados muestran la combinación de los efectos generados por la presencia del campo magnético real y por la modificación de la energía de tuneleo (pseudo campo magnético). En particular la asimetría local de subred, producida por la deformación central, se mantiene en presencia de campo magnético.

Se estudió el bombeo cuántico en sistemas bidimensionales utilizando el formalismo de Keldysh y el método de renormalización de Arrachea (2002). Se desarrolló un método más eficiente, basado en la ecuación de Dyson, para evaluar las expresiones que se obtienen del método de renormalización. Este método reduce el tiempo de cómputo y es completamente equivalente. Se implementó este método en código Fortran y se utilizó para el estudio de la corriente de bombeo de una red unidimensional de sitios y en una nanocinta de grafeno conectada a contactos de red cuadrada. En el caso de las nanocintas se obtuvieron resultados que concuerdan con los de la literatura y para las nanocintas de grafeno los resultados son preliminares.

7.1 Trabajo a futuro

La ingeniería de las deformaciones en grafeno es un campo en desarrollo que ofrece diferentes fenómenos y preguntas de interés físico y tecnológico. Una pregunta oportuna, por ejemplo, es acerca de la posibilidad de crear estados similares a los estados de borde, que se forman en las nanocintas zigzag, con deformaciones.

Una continuación natural del presente trabajo de tesis es considerar deformaciones que dependen del tiempo y analizar sus efectos en el transporte de electrones. Un posible objetivo de investigación en ese tipo de arreglo experimental es, por ejemplo, estudiar el efecto de la deformación que se produce en el grafeno con una punta de STM que se mueve de forma armónica en el tiempo. Con las herramientas que se han descrito en el presente trabajo de tesis se puede explorar este tipo de preguntas y contribuir al desarrollo tecnológico.

Lista de referencias

- Aleiner, I. L., Altshuler, B. L., y Kamenev, A. (2000). Quantum pumping in the magnetic field: Role of discrete symmetries. *Phys. Rev. B*, **62**(15): 10373–10376.
- Arrachea, L. (2002). Current oscillations in a metallic ring threaded by a time-dependent magnetic flux. *Phys. Rev. B*, **66**(4): 045315.
- Arrachea, L. (2004). dc response of a dissipative driven mesoscopic ring. *Phys. Rev. B*, **70**(15): 155407.
- Arrachea, L. (2005). Green-function approach to transport phenomena in quantum pumps. *Phys. Rev. B*, **72**(12): 125349.
- Arrachea, L. (2007). Exact green's function renormalization approach to spectral properties of open quantum systems driven by harmonically time-dependent fields. *Phys. Rev. B*, **75**(3): 035319.
- Arrachea, L. y Moskalets, M. (2006). Relation between scattering-matrix and keldysh formalisms for quantum transport driven by time-periodic fields. *Phys. Rev. B*, **74**(24): 245322.
- Avron, J. E., Elgart, A., Graf, G. M., y Sadun, L. (2002). Time-energy coherent states and adiabatic scattering. *Journal of Mathematical Physics*, **43**(7): 3415–3424.
- Bagwell, P. F. (1990). Evanescent modes and scattering in quasi-one-dimensional wires. *Phys. Rev. B*, **41**(15): 10354–10371.
- Bahamon, D. A. y Pereira, V. M. (2013). Conductance across strain junctions in graphene nanoribbons. *Phys. Rev. B*, **88**(19): 195416.
- Bao, W., Miao, F., Chen, Z., Zhang, H., Jang, W., Dames, C., y Lau, C. N. (2009). Controlled ripple texturing of suspended graphene and ultrathin graphite membranes. *Nature Nanotechnology*, **4**(9): 562–566.
- Bardeen, J. y Shockley, W. (1950). Deformation potentials and mobilities in non-polar crystals. *Phys. Rev.*, **80**(1): 72–80.
- Barraza-Lopez, S., Sanjuan, A. A. P., Wang, Z., y Vanević, M. (2013). Strain-engineering of graphene's electronic structure beyond continuum elasticity. *Solid State Communications*, **166**: 70 – 75.
- Benjamin, C. (2006). Detecting a true quantum pump effect. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, **52**(3): 403–410.
- Benjamin, C. (2013). How to detect a genuine quantum pump effect in graphene? *Applied Physics Letters*, **103**(4): 043120.
- Benjamin, R. y Benjamin, C. (2004). Quantum spin pumping with adiabatically modulated magnetic barriers. *Phys. Rev. B*, **69**(8): 085318.

- Bostwick, A., Ohta, T., Seyller, T., Horn, K., y Rotenberg, E. (2007). Quasiparticle dynamics in graphene. *Nature Physics*, **3**(1): 36–40.
- Brouwer, P. W. (1998). Scattering approach to parametric pumping. *Phys. Rev. B*, **58**(16): R10135–R10138.
- Bunch, J. S., Verbridge, S. S., Alden, J. S., van der Zande, A. M., Parpia, J. M., Craighead, H. G., y McEuen, P. L. (2008). Impermeable atomic membranes from graphene sheets. *Nano Letters*, **8**(8): 2458–2462.
- Burke, S. A. y Crommie, M. (2014). Private Communication.
- Buttiker, M. (1993). Capacitance, admittance, and rectification properties of small conductors. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **5**(50): 9361.
- Cadelano, E., Palla, P. L., Giordano, S., y Colombo, L. (2009). Nonlinear elasticity of monolayer graphene. *Phys. Rev. Lett.*, **102**(23): 235502.
- Castro Neto, A. H., Guinea, F., Peres, N. M. R., Novoselov, K. S., y Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, **81**(1): 109–162.
- Chen, H., Yao, Y., y Chen, S. (2013). Adhesive contact between a graphene sheet and a nano-scale corrugated surface. *Journal of Physics D: Applied Physics*, **46**(20): 205303.
- Cuevas, J. C., Heurich, J., Martín-Rodero, A., Levy Yeyati, A., y Schön, G. (2002). Subharmonic shapiro steps and assisted tunneling in superconducting point contacts. *Phys. Rev. Lett.*, **88**(15): 157001.
- Datta, S. (1995). *Electronic Transport in Mesoscopic System*. Cambridge University Press, Cambridge. 390 p.
- Davies, J. H. (1998). *The physics of low-dimensional semiconductors*. Cambridge University Press. 460 p.
- de Juan, F., Cortijo, A., y Vozmediano, M. A. H. (2007). Charge inhomogeneities due to smooth ripples in graphene sheets. *Phys. Rev. B*, **76**(16): 165409.
- De Martino, A., Dell’Anna, L., y Egger, R. (2007). Magnetic confinement of massless dirac fermions in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, **98**(6): 066802.
- Diago-Cisneros, L. y Mireles, F. (2013). Quantum-ring spin interference device tuned by quantum point contacts. *Journal of Applied Physics*, **114**(19): 193706.
- DiVincenzo, D. P. y Mele, E. J. (1984). Self-consistent effective-mass theory for intralayer screening in graphite intercalation compounds. *Phys. Rev. B*, **29**(4): 1685–1694.
- Doniach, S. y Sondheimer, E. H. (1974). *Green’s functions for solid state physicists*. Imperial College Press, London.
- Faria, D., Latgé, A., Ulloa, S. E., y Sandler, N. (2013). Currents and pseudomagnetic fields in strained graphene rings. *Phys. Rev. B*, **87**(24): 241403.

- Ferry, K., Goodnick, S. M., y Bird, J. (2009). *Transport in Nanostructures, 2nd ed.*. Cambridge University Press. 670 p.
- Fetter, A. L. y Walecka, J. D. (2003). *Quantum theory of many-particle systems*. Dover Publications Inc., Mineola, New York. 601 p.
- Frank, I. W., Tanenbaum, D. M., van der Zande, A. M., y McEuen, P. L. (2007). Mechanical properties of suspended graphene sheets. *Journal of Vacuum & Science Technology B*, **25**(6): 2558–2561.
- Fujita, M., Wakabayashi, K., Nakada, K., y Kusakabe, K. (????). Peculiar localized state at zigzag graphite edge. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **65**(7).
- Gelabert, M. M. y Serra, L. (2010). Linear conductance oscillations in quantum wires and stripes with rashba interaction. *Journal of Physics: Conference Series*, **248**(1): 012016.
- Georgiou, T., Britnell, L., Blake, P., Gorbachev, R. V., Gholinia, A., Geim, A. K., Casiraghi, C., y Novoselov, K. S. (2011). Graphene bubbles with controllable curvature. *Applied Physics Letters*, **99**(9): 093103.
- Geringer, V., Liebmann, M., Echtermeyer, T., Runte, S., Schmidt, M., Rückamp, R., Lemme, M. C., y Morgenstern, M. (2009). Intrinsic and extrinsic corrugation of monolayer graphene deposited on sio₂. *Phys. Rev. Lett.*, **102**(7): 076102.
- Gómez-Navarro, C., Burghard, M., y Kern, K. (2008). Elastic properties of chemically derived single graphene sheets. *Nano Letters*, **8**(7): 2045–2049.
- Goerbig, M. O. (2011). Electronic properties of graphene in a strong magnetic field. *Rev. Mod. Phys.*, **83**(4): 1193.
- Grichuk, E. y Manykin, E. (2013). Adiabatic quantum pumping in graphene with magnetic barriers. *The European Physical Journal B*, **86**(5): 210.
- Grifoni, M. y Hänggi, P. (1998). Driven quantum tunneling. *Physics Reports*, **304**(5–6): 229 – 354.
- Guinea, F., Katsnelson, M. I., y Geim, A. K. (2009). Energy gaps and a zero-field quantum hall effect in graphene by strain engineering. *Nature Physics*, **6**(1): 30–33.
- Haug, H. y Jauho, A.-P. (2007). *Quantum Kinetics in transport and optics of semiconductors. Springer serier in Solid-State Sciences 123*. Springer. 380 p.
- Žutić, I., Fabian, J., y Das Sarma, S. (2004). Spintronics: Fundamentals and applications. *Rev. Mod. Phys.*, **76**(2): 323–410.
- Ishigami, M., Chen, J. H., Cullen, W. G., Fuhrer, M. S., y Williams, E. D. (2007). Atomic structure of graphene on sio₂. *Nano Letters*, **7**(6): 1643–1648.
- Jauho, A.-P., Wingreen, N. S., y Meir, Y. (1994). Time-dependent transport in interacting and noninteracting resonant-tunneling systems. *Phys. Rev. B*, **50**(8): 5528–5544.

- Jellal, A., Mekkaoui, M., Choubabi, E. B., y Bahlouli, H. (2014). Tunneling of massive dirac fermions in graphene through time-periodic potential. *The European Physical Journal B*, **87**(6): 123.
- Kadanoff, L. P. y Baym, G. (1962). *Quantum statistical Mechanics: Green's funtion methods in equilibrium and nonequilibrium problems (Frontiers in Physics)*. W. A. Benjamin Inc., New York.
- Kashcheyevs, V. (2006). *Quantum pumping in mesoscopic systems*. Tesis de doctorado, Tel Aviv University, Tel Aviv, Israel.
- Kaur, T. (2013). *Thesis, Electronic transport in non-equilibrium nanoescale systems*. Ohio University, Athen, Ohio, USA.
- Keldysh, L. (1965). Diagram technique for nonequilibrium processes. *Sov. Phys. JETP*, **20**(4): 1018–1026.
- Kim, E.-A. y Neto, A. H. C. (2008). Graphene as an electronic membrane. *EPL (Europhysics Letters)*, **84**(5): 57007.
- Klimov, N. N., Jung, S., Zhu, S., Li, T., Wright, C. A., Solares, S. D., Newell, D. B., Zhitenev, N. B., y Strosio, J. A. (2012). Electromechanical properties of graphene drumheads. **336**(6088): 1557–1561.
- Kouwenhoven, L. P., Johnson, A. T., van der Vaart, N. C., Harmans, C. J. P. M., y Foxon, C. T. (1991). Quantized current in a quantum-dot turnstile using oscillating tunnel barriers. *Phys. Rev. Lett.*, **67**(12): 1626–1629.
- Lake, R., Klimeck, G., Bowen, R. C., y Jovanovic, D. (1997). Single and multiband modeling of quantum electron transport through layered semiconductor devices. *Journal of Applied Physics*, **81**(12): 7845–7869.
- Landau, L. y Lifshitz, E. M. (1970). *Theory of elasticity (Volumen 7 of A Course of Theoretical Physics)*. Pergamon Press, Cambridge. 187 p.
- Lassl, A., Schlagheck, P., y Richter, K. (2007). Effects of short-range interactions on transport through quantum point contacts: A numerical approach. *Phys. Rev. B*, **75**(4): 045346.
- Laughlin, R. B. (1981). Quantized hall conductivity in two dimensions. *Phys. Rev. B*, **23**(10): 5632–5633.
- Lee, C., Wei, X., Kysar, J. W., y Hone, J. (2008). Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *Science*, **321**(5887): 385–388.
- Lee, P. A. y Fisher, D. S. (1981). Anderson localization in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, **47**(12): 882–885.
- Levitov, L. (2001). Counting statistics of charge pumping in an open system. *arXiv preprint. cond-mat/0103617*.

- Levy, N., Burke, S. A., Meaker, K. L., Panlasigui, M., Zettl, A., Guinea, F., Neto, A. H. C., y Crommie, M. F. (2010). Strain-induced pseudo-magnetic fields greater than 300 tesla in graphene nanobubbles. *Science*, **329**(5991): 544–547.
- Lewenkopf, C. H. y Mucciolo, E. R. (2013).]the recursive green’s function method for graphene. *Journal of Computational Electronics*, **12**(2): 203.
- Linnik, T. L. (2012). Effective hamiltonian of strained graphene. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **24**(20): 205302.
- López, R., Aguado, R., Platero, G., y Tejedor, C. (1998). Kondo effect in ac transport through quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, **81**(21): 4688–4691.
- López, R., Aguado, R., Platero, G., y Tejedor, C. (2001). Low-temperature transport in ac-driven quantum dots in the kondo regime. *Phys. Rev. B*, **64**(7): 075319.
- López, R., Sánchez, D., y Platero, G. (2003). Dynamical instability of electric-field domains in ac-driven superlattices. *Phys. Rev. B*, **67**(3): 035330.
- Luttinger, J. M. y Kohn, W. (1955). Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields. *Phys. Rev.*, **97**(4): 869–883.
- Mañes, J. L. (2007). Symmetry-based approach to electron-phonon interactions in graphene. *Phys. Rev. B*, **76**(4): 045430.
- Mañes, J. L., de Juan, F., Sturla, M., y Vozmediano, M. A. H. (2013). Generalized effective hamiltonian for graphene under nonuniform strain. *Phys. Rev. B*, **88**(15): 155405.
- MacKinnon, A. (1985). The calculation of transport properties and density of states of disordered solids. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, **59**(4): 385–390.
- Mashoff, T., Pratzner, M., Geringer, V., Echtermeyer, T. J., Lemme, M. C., Liebmann, M., y Morgenstern, M. (2010). Bistability and oscillatory motion of natural nanomembranes appearing within monolayer graphene on silicon dioxide. *Nano Letters*, **10**(2): 461–465.
- Mattuck, R. D. (1992). *A guide to Feynman Diagrams in the many-body problem*. Dover Publications Inc., New York. 390 p.
- McClure, J. W. (1956). Diamagnetism of graphite. *Phys. Rev.*, **104**(3): 666–671.
- Meindl, J. D., Chen, Q., y Davis, J. A. (2001). Limits on silicon nanoelectronics for terascale integration. *Science*, **293**(5537): 2044–2049.
- Meyer, J. C., Geim, A. K., Katsnelson, M. I., Novoselov, K. S., Booth, T. J., y Roth, S. (2007). The structure of suspended graphene sheets. *Nature*, **446**(7131): 60–63.
- Mireles, F. y Kirczenow, G. (2002). Coherent spin-valve phenomena and electrical spin injection in ferromagnetic/semiconductor/ferromagnetic junctions. *Phys. Rev. B*, **66**(21): 214415.
- Moldovan, D., Ramezani Masir, M., y Peeters, F. M. (2013). Electronic states in a graphene flake strained by a gaussian bump. *Phys. Rev. B*, **88**(3): 035446.

- Morozov, S. V., Novoselov, K. S., Katsnelson, M. I., Schedin, F., Ponomarenko, L. A., Jiang, D., y Geim, A. K. (2006). Strong suppression of weak localization in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, **97**(1): 016801.
- Morpurgo, A. F. y Guinea, F. (2006). Intervalley scattering, long-range disorder, and effective time-reversal symmetry breaking in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, **97**(19): 196804.
- Moskalets, M. y Büttiker, M. (2001). Effect of inelastic scattering on parametric pumping. *Phys. Rev. B*, **64**(20): 201305.
- Moskalets, M. y Büttiker, M. (2002a). Floquet scattering theory of quantum pumps. *Phys. Rev. B*, **66**(20): 205320.
- Moskalets, M. y Büttiker, M. (2002b). Dissipation and noise in adiabatic quantum pumps. *Phys. Rev. B*, **66**(3): 035306.
- Moskalets, M. y Büttiker, M. (2004a). Adiabatic quantum pump in the presence of external ac voltages. *Phys. Rev. B*, **69**(20): 205316.
- Moskalets, M. y Büttiker, M. (2004b). Floquet scattering theory for current and heat noise in large amplitude adiabatic pumps. *Phys. Rev. B*, **70**(24): 245305.
- Moskalets, M. y Büttiker, M. (2007). Time-resolved noise of adiabatic quantum pumps. *Phys. Rev. B*, **75**(3): 035315.
- Mucha-Kruczynski, M. y Fal'ko, V. I. (2012). Pseudo-magnetic field distribution and pseudo-landau levels in suspended graphene flakes. *Solid State Communications*, **152**(15): 1442–1445.
- Nardelli, M. B. (1999). Electronic transport in extended systems: Application to carbon nanotubes. *Phys. Rev. B*, **60**(11): 7828–7833.
- Neek-Amal, M. y Peeters, F. M. (2012). Strain-engineered graphene through a nanostructured substrate. i. deformations. *Phys. Rev. B*, **85**(19): 195445.
- Niu, Q. y Thouless, D. J. (1984). Quantised adiabatic charge transport in the presence of substrate disorder and many-body interaction. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **17**(12): 2453.
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., Grigorieva, I. V., y Firsov, A. A. (2004). Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, **306**(5696): 666–669.
- Pacheco Sanjuan, A. A., Mehboudi, M., Harriss, E. O., Terrones, H., y Barraza-Lopez, S. (2014a). Quantitative chemistry and the discrete geometry of conformal atom-thin crystals. *ACS Nano*, **8**(2): 1136–1146.
- Pacheco Sanjuan, A. A., Wang, Z., Imani, H. P., Vanević, M., y Barraza-Lopez, S. (2014b). Graphene's morphology and electronic properties from discrete differential geometry. *Phys. Rev. B*, **89**(12): 121403.

- Pastawski, H. M. (1992). Classical and quantum transport from generalized landauer-büttiker equations. ii. time-dependent resonant tunneling. *Phys. Rev. B*, **46**(7): 4053–4070.
- Pothier, H., Lafarge, P., Urbina, C., Esteve, D., y Devoret, M. H. (1992). Single-electron pump based on charging effects. *EPL (Europhysics Letters)*, **17**(3): 249.
- Prada, E., San-Jose, P., y Schomerus, H. (2009). Quantum pumping in graphene. *Phys. Rev. B*, **80**(24): 245414.
- Rammer, J. y Smith, H. (1986). Quantum field-theoretical methods in transport theory of metals. *Rev.Mod.Phys.*, **58**(2): 323–359.
- Robinson, J. P. y Schomerus, H. (2007). Electronic transport in normal-conductor/graphene/normal-conductor junctions and conditions for insulating behavior at a finite charge-carrier density. *Phys. Rev. B*, **76**(11): 115430.
- Sancho, M. P. L., Sancho, J. M. L., y Rubio, J. (1984). Quick iterative scheme for the calculation of transfer matrices: application to mo (100). *Journal of Physics F: Metal Physics*, **14**(5): 1205.
- Schwierz, F. (2010). Graphene transistors. *Nat. Nano.*, **5**(7): 487–496.
- Shutenko, T. A., Aleiner, I. L., y Altshuler, B. L. (2000). Mesoscopic fluctuations of adiabatic charge pumping in quantum dots. *Phys. Rev. B*, **61**(15): 10366–10375.
- Sloan, J. V., Sanjuan, A. A. P., Wang, Z., Horvath, C., y Barraza-Lopez, S. (2013). Strain gauge fields for rippled graphene membranes under central mechanical load: An approach beyond first-order continuum elasticity. *Phys. Rev. B*, **87**(15): 155436.
- Spivak, B., Zhou, F., y Beal Monod, M. T. (1995). Mesoscopic mechanisms of the photovoltaic effect and microwave absorption in granular metals. *Phys. Rev. B*, **51**(19): 13226–13230.
- Suzuura, H. y Ando, T. (2002). Phonons and electron-phonon scattering in carbon nanotubes. *Phys. Rev. B*, **65**(23): 235412.
- Switkes, M., Marcus, C. M., Campman, K., y Gossard, A. C. (1999). An adiabatic quantum electron pump. *Science*, **283**(5409): 1905–1908.
- Thouless, D. J. (1983). Quantization of particle transport. *Phys. Rev. B*, **27**(10): 6083–6087.
- Thouless, D. J. y Kirkpatrick, S. (1981). Conductivity of the disordered linear chain. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, **14**(3): 235.
- van Wees, B. J., van Houten, H., Beenakker, C. W. J., Williamson, J. G., Kouwenhoven, L. P., van der Marel, D., y Foxon, C. T. (1988). Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. Lett.*, **60**(9): 848–850.
- Vavilov, M. G., Ambegaokar, V., y Aleiner, I. L. (2001). Charge pumping and photovoltaic effect in open quantum dots. *Phys. Rev. B*, **63**(19): 195313.
- Villarreal, R. C., Mireles, F., Marinero, E. E., y Gurney, B. A. (2011). Tuning fano-type resonances in coupled quantum point contacts by applying asymmetric voltages. *Applied Physics Letters*, **98**(17): 172102.

- Viola Kusminskiy, S., Campbell, D. K., Castro Neto, A. H., y Guinea, F. (2011). Pinning of a two-dimensional membrane on top of a patterned substrate: The case of graphene. *Phys. Rev. B*, **83**(16): 165405.
- Vozmediano, M., Katsnelson, M., y Guinea, F. (2010). Gauge fields in graphene. *Physics Reports*, **496**(4): 109 – 148.
- Wakker, G. M. M., Tiwari, R. P., y Blaauboer, M. (2011). Localization and circulating currents in curved graphene devices. *Phys. Rev. B*, **84**(19): 195427.
- Wallace, P. R. (1947). The band theory of graphite. *Phys. Rev.*, **71**(9): 622–634.
- Wang, B., Wang, J., y Guo, H. (2002). Parametric pumping at finite frequency. *Phys. Rev. B*, **65**(7): 073306.
- Wilhelm, J., Walz, M., y Evers, F. (2014). Ab initio quantum transport through armchair graphene nanoribbons: Streamlines in the current density. *Phys. Rev. B*, **89**(19): 195406.
- Wimmer, M. (2005). *Thesis, Quantum transport in nanostructures: From computational concepts to spintronics in graphene and magnetic tunnel junctions*. Universitätsverlag Regensburg, Germany.
- Winkler, R. y Zülicke, U. (2010). Invariant expansion for the trigonal band structure of graphene. *Phys. Rev. B*, **82**(24): 245313.
- Xu, H., Heinzl, T., Evaldsson, M., y Zozoulenko, I. V. (2008). Magnetic barriers in graphene nano ribbons: Theoretical study of transport properties. *Phys. Rev. B*, **77**(24): 245401.
- Xu, K., Cao, P., y Heath, J. R. (2009). Scanning tunneling microscopy characterization of the electrical properties of wrinkles in exfoliated graphene monolayers. *Nano Letters*, **9**(12): 4446–4451. PMID: 19852488.
- Zhu, R. y Chen, H. (2009). Quantum pumping with adiabatically modulated barriers in graphene. *Applied Physics Letters*, **95**(12): 122111.