



VNiVERSIDAD  
DSALAMANCA

CAMPUS DE EXCELENCIA INTERNACIONAL

TESIS DOCTORAL

---

# Transmisión y conductancia en dispositivos electrónicos basados en grafeno

---

Autora : Cristina Hernández Fuentevilla

Codirectores : Juan D. Lejarreta y Enrique Diez

*Esta tesis se presenta en cumplimiento de los requisitos para  
optar al grado de Doctor en Física en el Departamento de  
Física Aplicada por la Universidad de Salamanca*

2019



*A mi padre, Juan Luis “el pintor”.*



# Índice general

Resumen . . . . .	I
Abstract . . . . .	III
Agradecimientos . . . . .	V
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Prólogo . . . . .	1
1.2. Historia del grafeno . . . . .	2
1.3. Características electrónicas del grafeno . . . . .	5
1.4. Otros materiales 2D . . . . .	14
1.5. Organización de la tesis . . . . .	17
<b>2. Cálculo analítico del coeficiente de transmisión a través de una y dos barreras de potencial</b>	<b>21</b>
2.1. Introducción . . . . .	21
2.2. Coeficiente de transmisión para una barrera de potencial . . .	22
2.3. Coeficiente de transmisión a través de dos barreras de potencial	35
2.4. Resonancias para una doble barrera de potencial . . . . .	46
2.5. Resumen y conclusiones . . . . .	48
<b>3. Influencia del ángulo de incidencia en la conductancia</b>	<b>51</b>
3.1. Introducción . . . . .	51
3.2. Conductancia efectiva . . . . .	51
3.3. Modelo para el GFET . . . . .	56
3.4. Conductancia efectiva del GFET . . . . .	58
3.5. Conductancia efectiva ponderada . . . . .	63
3.5.1. Distribución gaussiana . . . . .	64
3.5.2. Distribución delta . . . . .	67
3.6. Resumen y conclusiones . . . . .	74
<b>4. Transmisión a través de múltiples barreras de potencial</b>	<b>77</b>
4.1. Introducción . . . . .	77
4.2. Múltiples barreras de potencial . . . . .	78

4.2.1.	Barreras con idéntica energía potencial . . . . .	81
4.2.2.	Barreras con diferente energía potencial . . . . .	87
4.3.	Barrera de potencial escalonada . . . . .	91
4.3.1.	Barrera gaussiana . . . . .	94
4.4.	Resumen y conclusiones . . . . .	95
<b>5.</b>	<b>Barreras de potencial bajo campo eléctrico</b>	<b>97</b>
5.1.	Introducción . . . . .	97
5.2.	Electrón bidimensional de Dirac en un potencial lineal . . . . .	99
5.3.	Una barrera de potencial sometida a campo eléctrico . . . . .	102
5.4.	Dos barreras de potencial sometidas a campo eléctrico . . . . .	110
5.5.	Campo eléctrico elevado . . . . .	116
5.6.	Resumen y conclusiones . . . . .	122
<b>6.</b>	<b>Constricciones en nanocintas de grafeno</b>	<b>127</b>
6.1.	Introducción . . . . .	127
6.2.	Estados electrónicos en una nanocinta de grafeno . . . . .	129
6.3.	Estrechamiento en una nanocinta . . . . .	132
6.4.	Nanoconstricción rectangular en una nanocinta . . . . .	137
6.5.	Resumen y conclusiones . . . . .	145
<b>A.</b>	<b>Densidad de portadores</b>	<b>147</b>
A.1.	Expresión general para la densidad de portadores . . . . .	147
	Conclusiones . . . . .	151
	Lista de publicaciones . . . . .	155
	Bibliografía . . . . .	157

# *Resumen*

## **Transmisión y conductancia en dispositivos electrónicos basados en grafeno**

El objetivo principal de esta tesis ha sido caracterizar analíticamente el transporte electrónico a través de una lámina de grafeno sometida a distintas puertas de potencial y/o constricciones. Hemos estudiado el coeficiente de transmisión en una lámina de grafeno sometida a diferentes barreras de potencial unidimensional. El hecho de que el coeficiente de transmisión sea unitario para ciertos ángulos, provoca que no pueda existir confinamiento de portadores de carga mediante una barrera de potencial eléctrico. Sin embargo, es posible obtener un pseudogap de energía en el coeficiente de transmisión, para ciertos valores de los parámetros, si se dirige de un modo adecuado el haz de incidencia de los electrones en la lámina. La introducción de una segunda barrera de potencial origina una serie de picos de resonancia en el pseudogap cuya posición ha sido identificada analíticamente. Finalmente, se ha considerado el método de la matriz de transferencia para construir el coeficiente de transmisión de una heteroestructura formada con un número indeterminado de barreras.

A continuación, consideramos la aplicación de los resultados anteriores a un dispositivo físico real: un transistor de efecto de campo de grafeno (GFET). Construimos un modelo para el GFET y determinamos su conductancia dependiendo de la dirección de impacto de los portadores y su ponderación sobre la barrera de potencial. Describimos así una distribución de portadores incidentes alejada de la configuración uniforme característica de muestras homogéneas, y cuantificamos de este modo los efectos de inhomogeneidad en la lámina de grafeno.

Con el fin de mejorar y refinar nuestro modelo, hemos introducido el campo eléctrico asociado a la diferencia de potencial entre surtidor y drenador  $V_{DS}$ , por medio de un potencial efectivo lineal en ciertas regiones de la lámina de grafeno bajo las top gate, que introducen una barrera de potencial proporcional a la diferencia de potencial entre la puerta superior e inferior  $V_{TG} - V_{BG}$ .

En este proceso de someter a los portadores de corriente a diferentes impedimentos a su paso que controlen la corriente, sustituimos las láminas de anchura infinita por nanocintas de anchura fija, y las puertas de potencial por estrechamientos en la cinta. Con este objetivo, en el último capítulo estudiamos los efectos de una constricción rectangular en la conductancia de una nanocinta de grafeno. Obtenemos una expresión analítica de dicha conductancia, que pone de manifiesto cómo puede manipularse la relación de anchuras en las diferentes regiones de la cinta, para modular la corriente, y evidencia comportamientos muy diferentes dependiendo del carácter metálico o semimetálico de la zona del estrechamiento y del resto de la cinta. En general, veremos que la conductancia va a venir dada por la conducción de la parte más estrecha de la cinta. Finalmente, hemos comparado nuestros resultados para distintas cintas con parámetros adecuados, que exploran la diversidad de casos posibles, con los obtenidos por otros grupos que tratan el mismo problema con métodos de tight-binding convencionales. Aunque el acuerdo no siempre es del todo satisfactorio, creemos que este trabajo analítico, unido a una mayor potencia de cálculo, puede ser útil en la descripción del comportamiento de estos dispositivos y algunos otros relacionados.

**Palabras clave :** Grafeno, GFET, nanocinta, nanoconstricción.

# *Abstract*

## **Transmission and conductance in electronic devices based on graphene**

The main objective of this thesis has been to characterize analytically the electronic transport through a graphene sheet subjected to different potential gates and/or constrictions. We have studied the coefficient of transmission in a graphene sheet subjected to different barriers of one-dimensional potential. The fact that the transmission coefficient is unitary for certain angles, causes that there can be no confinement of charge carriers through an electric potential barrier. However, it is possible to obtain a pseudogap of energy in the transmission coefficient, for certain values of the parameters, if directed in an appropriate way the incident beam of incidence of electrons in the sheet. The introduction of a second potential barrier originates a series of resonance peaks in the pseudogap whose position has been analytically identified. Finally, it has been considered the method of the transfer matrix to build the transmission coefficient of a heterostructure formed with an indetermined number of barriers.

Next, we consider the application of the previous results to a real physical device : a graphene field effect transistor (GFET). We build a model for the GFET and we determine its conductance depending on the direction of impact of the carriers and their weighting on the potential barrier. Thus, we describe a distribution of incident carriers away from the uniform characterization of homogeneous samples, and quantify in this way the effects of inhomogeneity on the sheet graphene.

In order to improve and refine our model, we have introduced the electric field associated with the potential difference between source and drain  $V_{DS}$ , by means of a linear effective potential in certain regions of the sheet of graphene under the top gate, which introduce a barrier of potential proportional to the difference between top gate and back gate potential  $V_{TG} - V_{BG}$ .

In this process of subjecting the current carriers to different impediments

in their path that control the current, we replace the sheets with infinite width by fixed width nanoribbons, and the potential gates with narrowings in the ribbon. With this objective, in the last chapter we studied the effects of a rectangular constriction on the conductance of a graphene nanoribbon. We obtain an analytical expression of this conductance, which reveals how the relation of widths in the different regions of the ribbon can be manipulated, to modulate the current, and evidence very different behaviors depending on the metallic or semi-metallic character of the narrowing area and the other areas. In general, we will see that the conductance will come from the conduction of the narrowest part of the ribbon. Finally, we have compared our results for different ribbons with appropriate parameters, that explore the diversity of possible cases, with those obtained by other groups that treat the same problem with conventional tight-binding methods. Although the agreement is not always completely satisfactory, we believe that this analytical work, together with a greater calculation power, can be useful in describing the behavior of these devices and some other related ones.

**Key words :** Graphene, GFET, nanoribbon, nanoconstriction.

# *Agradecimientos*

Mi más profundo agradecimiento a mis directores de tesis, al Dr. Juan D. Lejarreta y al Dr. Enrique Diez. A Leja, por introducirme en el mundo de la investigación, enseñarme a lo largo de todos estos años el bagaje matemático para poder acceder a la resolución de los problemas planteados, y por su constancia en dicha labor. A Enrique, por su entusiasmo, transmisión del conocimiento experimental, visión global de los problemas, y ánimos a lo largo de todo este proceso. Gracias al Dr. José M<sup>a</sup> Cerveró por su apoyo, y también al resto del grupo de investigación, del cual formo parte, en especial a Vito.

A mi familia : hijos, marido, madre, y a aquéllos que ya no están - especialmente padre y abuela - por su amor, y complicidad para la realización de esta tesis.



# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Prólogo

Esta tesis pretende combinar la parte teórica y la parte experimental en el conocimiento y comprensión del transporte electrónico en grafeno. Relaciona los campos de la Mecánica Cuántica, la Electrónica y la Nanotecnología, en consonancia con el tiempo actual en el cual se demanda un conocimiento interdisciplinar. A lo largo de ella consideraremos el transporte cuántico de los portadores de carga en un material llamado grafeno. El término *graphene* fue introducido por H. P. Boehm como una combinación de la palabra *graphite* refiriéndose al carbono en su forma cristalina ordenada, y el sufijo *-ene* asociado a los hidrocarburos aromáticos policíclicos en los cuales los átomos de carbono forman estructuras en anillo hexagonal [1]. Existen dos tipos extremos de transporte dependiendo de la extensión del medio y de la longitud del camino libre medio de los portadores. Cuando las dimensiones del medio (en nuestro caso las muestras de grafeno) a través de las cuales se propagan los portadores son superiores a su longitud del camino libre medio estamos en un régimen difusivo [2], mientras que si sucede lo contrario, el régimen de conducción es balístico [3]. La longitud del camino libre medio de los portadores depende mucho de la proporción de impurezas en la muestra, que actúan como centros de dispersión, y de la temperatura, que aumenta la probabilidad de colisión. En el grafeno de alta pureza, los electrones pueden viajar largas distancias del orden de micrómetros antes de colisionar, incluso a temperatura ambiente [4]. A bajas temperaturas ( $< 40$  K) se llegan a alcanzar longitudes del camino libre medio tan elevadas como  $28 \mu\text{m}$  [5, 6].

Por todo ello, podemos afirmar que el transporte electrónico en grafeno, para muestras de dimensiones nanométricas y a bajas temperaturas posiblemente transcurre en régimen balístico.

En el título de esta tesis, con *transmisión* nos referimos al *coeficiente de transmisión* que calcularemos más adelante en los siguientes capítulos bajo diversas circunstancias. Sin embargo, el coeficiente de transmisión no es una cantidad medible macroscópicamente. No obstante, está relacionada (mediante el formalismo de Landauer) con la *conductancia*, para la cual sí se pueden realizar medidas experimentales. Recordamos que la conductancia relaciona de manera macroscópica la corriente total  $I$  con la caída de voltaje  $V$ , mediante  $I = G \cdot V$ .

La elección del *grafeno* viene motivada por ser un *nanomaterial* con una enorme potencialidad al permitir el transporte balístico a temperatura ambiente. Sin embargo, a raíz de su descubrimiento, se comprobó que ésta y otras propiedades inusuales no son exclusivas del grafeno. Éste es sólo el primero de un nuevo grupo de materiales conocidos como materiales 2D a los que, por semejanza, se podría aplicar también nuestros métodos y resultados con sólo ligeras modificaciones. Todos ellos se aventuran, por sus propiedades inusuales, como el futuro en la Electrónica.

## 1.2. Historia del grafeno



Figura 1.1: Grafito.

El carbono es la base de la vida, ya que forma parte de todos los compuestos orgánicos. Aparece en la corteza terrestre en un porcentaje no superior al

0.1 % . Se presenta comúnmente en su forma tridimensional en dos variedades alotrópicas, el grafito, representado en la figura Fig. 1.1 y el diamante. En las últimas décadas han ido apareciendo *nuevas formas cristalinas* como los nanotubos de carbono, los fullerenos y el grafeno. Aunque tienen en común con la mayor parte de los anteriores, la colocación de átomos de carbono en una disposición de red hexagonal (el diamante tiene una red cúbica), sin embargo presentan dimensiones muchísimo más reducidas, por lo que se les denomina *sólidos de baja dimensión* o *nanomateriales*. Previo a la irrupción en el panorama científico del grafeno, los *nanotubos de carbono* fueron descubiertos en 1991 por Sumio Iijima [7], el cual recibió el Premio Príncipe de Asturias de Investigación Científica y Técnica en 2008. Este estudio de los nanotubos de carbono sirvió para estudiar luego más fácilmente el grafeno, al tratarse también de un material de bajas dimensiones compuesto por átomos de carbono.



Figura 1.2: Imágen de grafeno monocapa (zona con menor contraste) obtenida en el laboratorio mediante un microscopio electrónico.

El grafeno es un material obtenido *experimentalmente* por primera vez en un laboratorio en el año 2004 por André Geim y Konstantin Novoselov pertenecientes a la Universidad de Manchester [8] determinando sus asombrosas propiedades (aunque existían trabajos experimentales previos como puntualiza Geim en [9]). En esa época se creía que debido a cálculos termodinámicos previos, no podían existir cristales aislados en dos dimensiones (2D) de manera estable. Frente a dicho prejuicio, los investigadores de Man-

chester realizaron experimentalmente con éxito el aislamiento de una lámina de grafeno, para ello usaron el método de 'escisión micromecánica'. Éste es un método rudimentario pero eficaz, con el cual se consigue aislar una única capa de grafeno partiendo de grafito, que está constituido por un conjunto de ellas. El método consiste en utilizar cinta adhesiva para ir exfoliando el grafito sucesiva y repetidamente, pegando y separando, pegando y separando, hasta que únicamente quede una monocapa. Posteriormente es necesario depositarlo sobre un substrato, por ejemplo en una oblea de silicio. En el laboratorio obtuve grafeno monocapa siguiendo el proceso anterior, tal y como se observa en la imagen obtenida mediante un microscopio electrónico en la figura Fig. 1.2, donde la tonalidad más clara corresponde a una única capa, y por tanto grafeno. La obtención experimental por primera vez del grafeno dió lugar a que sus autores recibiesen el premio Nobel de Física en el año 2010 [10]. Cabe reseñar que aunque la realización experimental del grafeno ha tenido lugar en el siglo XXI; mucho antes, en 1947, ya se había tratado de forma teórica el grafeno [11] como derivado del grafito. Otro ejemplo de que el estudio teórico precedió a la obtención experimental del grafeno, es el estudio del comportamiento de una partícula relativista con masa no nula descrita por medio de la ecuación de Dirac, y la transmisión de esta partícula a través de una barrera de potencial por efecto túnel [12].

Existen muchas características sorprendentes que posee el grafeno frente a otros materiales, sin embargo nuestro interés se centrará en las propiedades electrónicas. Entre las diversas características que hacen que el grafeno sea un material muy diferente a los semiconductores convencionales están:

- La estructura de bandas del grafeno ideal (sin impurezas) no presenta gap de energía entre la banda de valencia y la de conducción [13, 14], es decir es un *semimetal*.
- La *relación de dispersión* energía - momento es *lineal* en las bandas de conducción y valencia [15], frente a la relación cuadrática obtenida para los semiconductores convencionales.
- Los electrones en el grafeno se comportan como partículas relativistas sin masa (ultrarrelativistas) [15], lo que confiere al grafeno una *alta movilidad electrónica*. Experimentalmente se encuentra que la movilidad  $\mu$  puede exceder  $15.000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  a una concentración de portadores de  $10^{13} \text{ cm}^{-2}$  [16].

La movilidad extraordinariamente elevada a alta temperatura de los portadores de carga, tanto como  $2 \cdot 10^5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  [17], indica que los electrones

en el grafeno viajan en régimen balístico. Esta movilidad tan elevada [4] es una característica deseable en aplicaciones electrónicas de alta frecuencia [18].

La movilidad de los portadores y el nivel de dopado químico son figuras de mérito esenciales, y la caracterización de estas propiedades a gran escala junto con su uniformidad es un prerrequisito para la comercialización de dispositivos electrónicos constituidos con grafeno [19]. Por ahora, los dispositivos electrónicos basados en el grafeno no están implantados en el mercado debido a su coste, o porque existen soluciones de otro tipo, con mejores características, sin necesidad de usar grafeno. Se necesita poder fabricar grafeno más barato, en grandes cantidades y de la mejor calidad posible, para poder llegar a una comercialización de éste. Innovadores avances en la investigación y aplicaciones industriales del grafeno hacen que la producción en *grandes cantidades* y a un *coste razonable* sea una etapa necesaria antes de alcanzar aplicaciones en el mundo del mercado de consumo [20].

Existen aplicaciones en distintos campos, como aplicaciones derivadas de su impermeabilidad [21], sensores electrónicos para la detección de moléculas químicas y biológicas [22, 23], la utilización de su capacidad como supercapacitor [24], y como baterías [25]. También heteroestructuras activas de materiales 2D impresos con tintas de grafeno y nitruro de boro hexagonal, usadas para fabricar transistores de efecto de campo lavables, flexibles e impresos en tinta sobre material textil [26].

### 1.3. Características electrónicas del grafeno

Las propiedades tan inusuales del grafeno, comparadas con áquellas de los semiconductores tradicionales, hacen esperar que las características del transporte en el grafeno, y en particular, el coeficiente de transmisión para el grafeno sea muy diferente al obtenido en los semiconductores tradicionales. Por la misma razón, parece natural que la mecánica cuántica tradicional, basada en la ecuación de Schrödinger no pueda explicar propiedades tan inusuales. Los electrones en el grafeno sin impurezas se presentan como partículas ultrarrelativistas y deben ser descritos por la *ecuación de Dirac* [8, 27].

El grafeno es un material que consiste en una lámina de átomos de carbono, de un único átomo de espesor, ocupando los átomos de carbono las posiciones de los vértices de hexágonos regulares que constituyen una estructura de *panal de abejas* [16]. Esta estructura bidimensional es la causa de la notable flexibilidad estructural del grafeno, que se refleja en sus propiedades electrónicas. El átomo de carbono en hibridación  $sp^2$  proporciona una *es-*

*estructura trigonal plana* soportada por enlaces C - C tipo  $\sigma$ , que cada átomo establece con los tres átomos vecinos, generando así una estructura hexagonal de enlaces localizados que proporciona robustez al material. Perpendicular a esta estructura se disponen los orbitales atómicos  $p_z$  no hibridados (uno por cada átomo de carbono). Cuya superposición entre átomos vecinos da lugar a la formación de una banda de enlaces tipo  $\pi$  cuyos electrones se deslocalizan a través de la lámina de grafeno.

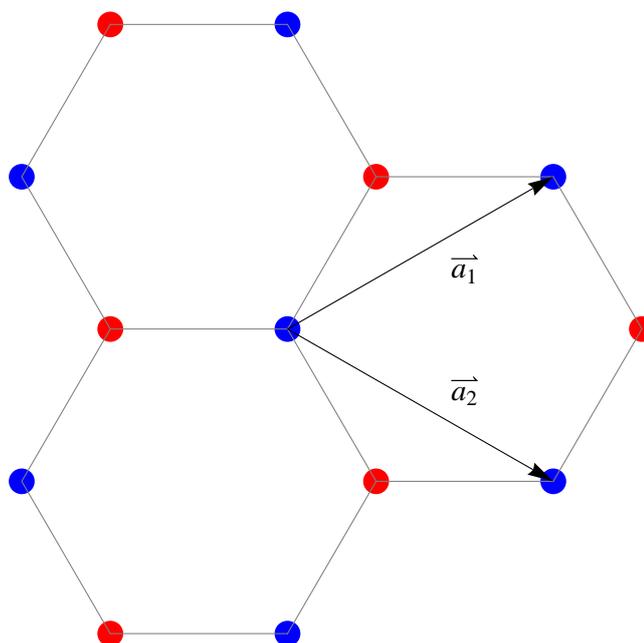


Figura 1.3: Estructura de la red atómica del grafeno. Los círculos rojos (azules) representan a los átomos de la subred A (B), respectivamente.

En la figura Fig. 1.3 observamos que la red atómica tiene una estructura triangular con una base de dos átomos por celda unidad [14]. Los átomos de la subred  $A(B)$  están representados por círculos rojos (azules). Un átomo de la subred A tiene como vecinos más próximos a tres átomos de la subred B, y viceversa. Tomamos como vectores de red

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

siendo  $a \approx 0.142$  nm la distancia mínima entre dos átomos de carbono próximos. Se obtienen los vectores de la red recíproca imponiendo

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad (1.2)$$

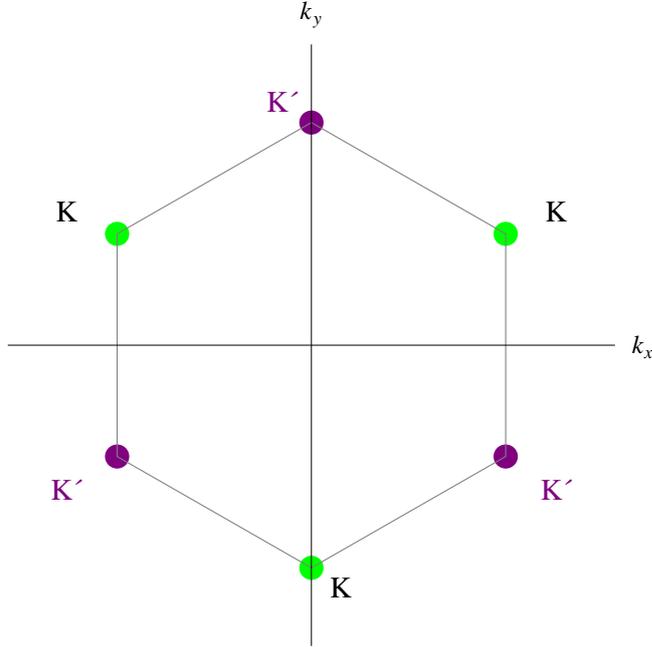


Figura 1.4: Primera zona de Brillouin hexagonal para la red hexagonal. Los círculos verdes (morados) representan los puntos  $\mathbf{K}$  ( $\mathbf{K}'$ ), respectivamente.

Y así obtenemos

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}). \quad (1.3)$$

Al hacer la bisectriz de los vectores  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{b}_1$ ,  $-\vec{a}_1$ ,  $-\vec{b}_1$ ,  $\vec{a}_1 + \vec{b}_1$ ,  $-(\vec{a}_1 + \vec{b}_1)$  obtenemos la primera zona de Brillouin, tal y como aparece representada en la figura Fig. 1.4, donde los círculos verdes son los *puntos*  $\mathbf{K}$ :

$$\frac{2 \cdot \pi}{a} \left( \frac{1}{3}, \frac{1}{3\sqrt{3}} \right), \quad \frac{2 \cdot \pi}{a} \left( \frac{-1}{3}, \frac{1}{3\sqrt{3}} \right), \quad \frac{2 \cdot \pi}{a} \left( 0, \frac{-2}{3\sqrt{3}} \right), \quad (1.4)$$

y los *puntos*  $\mathbf{K}'$  son los círculos morados:

$$\frac{2 \cdot \pi}{a} \left( 0, \frac{2}{3\sqrt{3}} \right), \quad \frac{2 \cdot \pi}{a} \left( \frac{-1}{3}, \frac{-1}{3\sqrt{3}} \right), \quad \frac{2 \cdot \pi}{a} \left( \frac{1}{3}, \frac{-1}{3\sqrt{3}} \right). \quad (1.5)$$

La estructura de bandas del grafeno es conocida desde hace muchos años. Su estudio se remonta a 1947 con los trabajos de Wallace [11]. Él utilizó la aproximación de electrones fuertemente ligados, los cuales pueden saltar sólo entre átomos vecinos, situados a una distancia no superior a dos átomos.

Así consiguió describir por primera vez la estructura de bandas del grafeno, apareciendo descrita en [14] en su forma actual.

Supongamos que tenemos  $N$  electrones  $p_z$  del carbono, uno por cada átomo de la red, los cuales se extienden por el cristal con pseudomomento o vector de onda  $\mathbf{k}$ , alojándose en dos bandas de energía dadas a partir del hamiltoniano de enlace fuerte, por las siguientes expresiones:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm t\sqrt{3 + f(\mathbf{k})} - t'f(\mathbf{k}) \quad (1.6)$$

$$f(\mathbf{k}) = 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right) \quad (1.7)$$

La fórmula Eq[1.6] describe la energía de los electrones en la banda de conducción (signo +), y en la banda de valencia (signo -) para el grafeno. Además  $t \approx 2.8 \text{ eV}$  es la energía requerida para el salto entre el electrón de un átomo de carbono y el átomo vecino más próximo (es decir la realización de un salto entre distintas subredes A y B), y  $t'$  representa la energía requerida para el salto entre el electrón de un átomo de carbono y el átomo vecino más próximo en segundo grado (es decir la realización de un salto entre átomos de la misma subred bien sea A, o bien B). Vamos a tomar  $t' \approx 0,2 \cdot t$  (en cualquier caso, siempre es una fracción propia de  $t$ ), y  $a \approx 0.142 \text{ nm}$  es la distancia  $C - C$ , como dijimos antes. Observamos en la expresión Eq[1.6] que si el segundo término de la derecha fuese despreciable, entonces las bandas de conducción y valencia serían completamente *simétricas*, siendo habitual utilizar esta aproximación.

Existen dos puntos de la red recíproca del grafeno con vectores de onda  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  ( y sus equivalentes, como hemos calculado antes) con alta simetría

$$\mathbf{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right), \quad \mathbf{K}' = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right), \quad (1.8)$$

en los cuales  $f(\mathbf{K}) = f(\mathbf{K}') = -3$ , y por tanto según la ecuación Eq[1.6] la energía en dichos puntos es nula, es decir  $E(\mathbf{K}) = E(\mathbf{K}') = 0$ . Dichos puntos  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  se llaman *puntos de Dirac*. En la *aproximación* en que trabajamos, el espectro de energía resulta simétrico en torno a dichos puntos de energía nula. Apareciendo así, *para pequeños valores de energía* un *cono de Dirac* en torno a cada uno de los seis puntos de Dirac.

Si consideramos únicamente la región del espacio de momentos próxima a uno de los puntos de Dirac, la energía de las bandas de conducción y/o valencia pueden ser aproximada entorno a dicho punto de Dirac como  $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{q}$  o  $\mathbf{k} = \mathbf{K}' + \mathbf{q}$ , resultando entonces que la energía se puede expresar como:

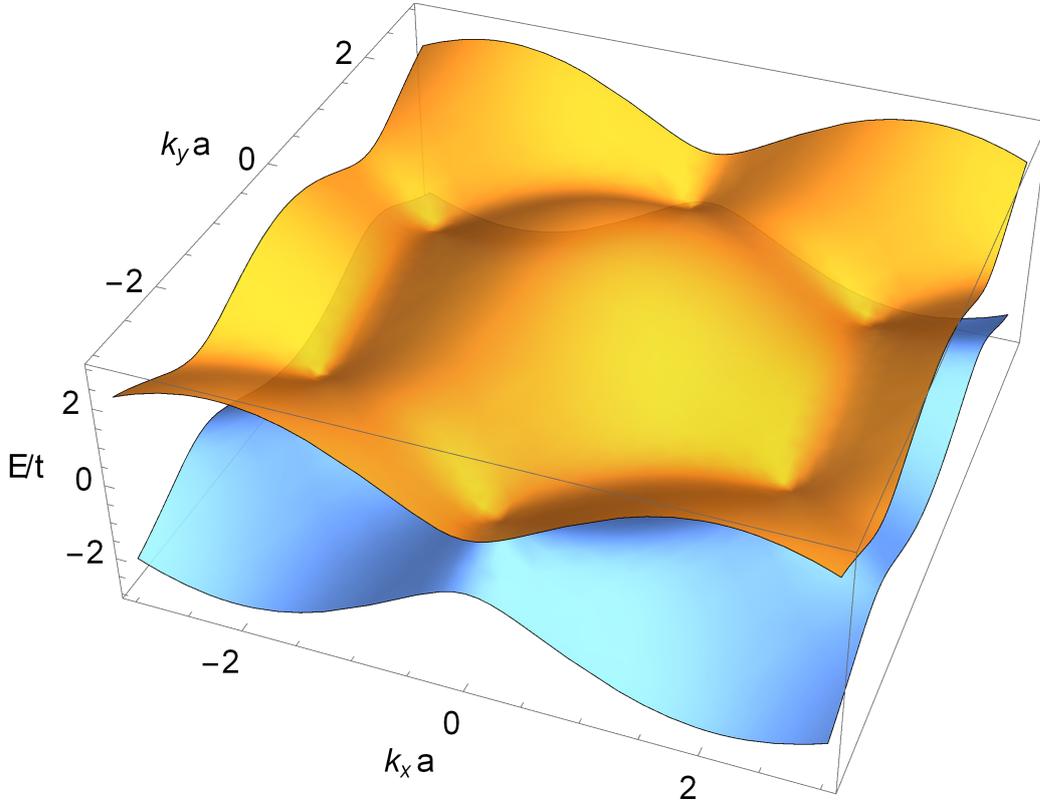


Figura 1.5: Espectro de energía del grafeno frente a  $k_x a$  y  $k_y a$ . Aparecen seis conos de Dirac en torno a los seis puntos de Dirac, donde la energía es nula.

$$E_{\pm}(|\mathbf{q}|) = \pm \frac{3}{2} \hbar a t \sqrt{q_x^2 + q_y^2} + O\left[\frac{|\mathbf{q}|^2}{|\mathbf{K}|^2}\right] = \pm \hbar v_F |\mathbf{q}| + O\left[\frac{|\mathbf{q}|^2}{|\mathbf{K}|^2}\right] \quad (1.9)$$

donde  $\mathbf{q}$  es el momento del cristal relativo a un punto de Dirac,  $v_F$  es la *velocidad de Fermi* que viene dada por  $v_F = 3at/2$ , y cuyo valor aproximado es  $v_F \simeq c/300 \simeq 1 \cdot 10^6$  m/s, siendo  $c$  la velocidad de la luz en el vacío. La velocidad de Fermi es uno de los conceptos clave en el estudio del grafeno. A lo largo del tiempo se ha tratado de buscar un valor cada vez más exacto para la velocidad de Fermi, resultado de ello son diferentes artículos en los cuales se ha estudiado la variación de la velocidad de Fermi bajo ciertas condiciones, por ejemplo cuando se cambia la concentración de portadores  $n$  [28], también cuando el entorno en el cual se encuentra el grafeno se modifica, lo cual lleva a una modificación en la velocidad de Fermi [29], que es inversamente proporcional a la constante dieléctrica, alcanzando un valor de  $\sim 2,5 \cdot 10^6$  m/s.

Despreciando términos de segundo orden en la expresión Eq[1.9], obtenemos una relación de *dispersión lineal* entre la energía y el momento

$$E_{\pm}(|\mathbf{q}|) = \pm \hbar v_F |\mathbf{q}| \quad (1.10)$$

La energía de dispersión en la expresión Eq[1.10] recuerda a la energía de partículas ultrarelativistas, las cuales son descritas en Mecánica Cuántica mediante la ecuación de Dirac sin masa. La relación de dispersión Eq[1.10] demuestra que los portadores de carga - electrones y huecos - en un estado de la banda se mueven a velocidad

$$\mathbf{v}_{\pm} = \frac{1}{\hbar} \mathbf{grad}_{\mathbf{k}} E_{\pm} = \pm \frac{3}{2} v_F \frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|} = \pm v_F \frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|} \quad (1.11)$$

Observamos en la expresión Eq[1.11] que los electrones en la banda de conducción se mueven a la velocidad de Fermi en el sentido del momento, mientras que los huecos en la banda de valencia lo hacen a la velocidad de Fermi, pero en sentido contrario. En los semiconductores tradicionales definidos a partir de la ecuación de Schrödinger, la dependencia de la energía con el momento era cuadrática, y por ello la velocidad dependía de la energía, mientras que en el grafeno la velocidad se mantiene constante, y cuyo valor es la velocidad de Fermi. Este comportamiento de los portadores recuerda al de una partícula ultrarelativista descrita por un Hamiltoniano de Dirac [30], que puede utilizarse por consiguiente para describir el estado de los electrones en el grafeno bidimensional.

La relación de dispersion Eq[1.10], ha sido observada experimentalmente en [31] a través de la dependencia de la masa ciclotrónica de los electrones del grafeno con la densidad electrónica. Dicha relación  $m^* \propto \sqrt{n}$ , expresa que la masa ciclotrónica es proporcional a la raíz cuadrada de la densidad de portadores, en lugar de constante como sucede con una relación de dispersión de tipo parabólico, que es típica de los semiconductores tradicionales. La *observación experimental* de la dependencia de  $m^*$  con  $\sqrt{n}$  evidencia la existencia de las partículas de Dirac sin masa en el grafeno.

Los electrones en una lámina bidimensional de grafeno se describen mediante un hamiltoniano efectivo que consiste en dos copias del hamiltoniano bidimensional de Dirac, una para momentos cercanos a  $\mathbf{K}$  y otra para momentos cercanos a  $\mathbf{K}'$ . Las funciones de onda para momentos cercanos a  $\mathbf{K}$  y a  $\mathbf{K}'$  están relacionadas mediante una simetría de inversión temporal [14,30]. Por ello, suele bastar con una única copia del hamiltoniano bidimensional de Dirac. En caso de incluir un determinado potencial externo  $V(x, y)$ , su energía potencial  $U(x, y)$  será proporcional, y se puede expresar como

$$H = v_F(\sigma_x P_x + \sigma_y P_y) + U(x, y) \quad (1.12)$$

siendo  $\sigma_x$  y  $\sigma_y$  las correspondientes matrices de Dirac

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.13)$$

Cada electrón en el grafeno con un momento próximo a uno de los puntos de Dirac se describe mediante una función de onda espinorial de dos componentes

$$\Psi(x, y, t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \begin{pmatrix} \varphi_1(x, y) \\ \varphi_2(x, y) \end{pmatrix} \quad (1.14)$$

que cumple el sistema de ecuaciones acopladas

$$E\varphi_1 = U\varphi_1 - i\hbar v_F \left( \frac{\partial \varphi_2}{\partial x} - i \frac{\partial \varphi_2}{\partial y} \right), \quad (1.15)$$

$$E\varphi_2 = U\varphi_2 - i\hbar v_F \left( \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} + i \frac{\partial \varphi_1}{\partial y} \right). \quad (1.16)$$

Para un electrón libre ( $U = 0$ ) o sometido a una energía potencial constante  $U = U_o \neq 0$  la solución se expresa como una combinación lineal de ondas planas espinoriales. Las funciones de onda de la base se clasifican por su momento en el cristal  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  y por su energía  $E$ . Los estados accesibles al electrón corresponden a las funciones de onda:

$$\Psi_{\pm}(x, y, t) = \frac{1}{\sqrt{2LW}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \frac{E_{\pm}}{\hbar}t)} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm \frac{k_x + ik_y}{|\mathbf{k}|} \end{pmatrix} \quad (1.17)$$

que están normalizadas en el rectángulo de dimensiones  $L \times W$ . Dichos estados tienen las siguientes propiedades:

- Un electrón en el estado  $\Psi_+(x, y, t)$  posee una energía dada por:

$$E_+ = U_o + \hbar v_F |\mathbf{k}| \quad (1.18)$$

y le corresponde un momento en el cristal  $\mathbf{k}$ . Se mueve a la velocidad de Fermi en el sentido del momento  $\langle \mathbf{v}_+ \rangle = \frac{1}{\hbar} \mathbf{grad}_{\mathbf{k}} E_+ = v_F \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}$ , y transporta una densidad de corriente eléctrica  $\mathbf{j}_+ = -ev_F \Psi_+^\dagger \boldsymbol{\sigma} \Psi_+ = -e \frac{v_F}{LW} \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}$  en sentido opuesto al momento. Tiene además una helicidad definida según Eq[1.24] igual a  $\frac{1}{2}$  en el mismo sentido del momento. Estos estados constituyen la *banda de conducción* en el grafeno sometido a un potencial externo constante  $U_o$ .

- Un electrón en el estado  $\Psi_-(x, y, t)$  posee una energía

$$E_- = U_o - \hbar v_F |\mathbf{k}| \quad (1.19)$$

y le corresponde un momento en el cristal  $\mathbf{k}$ . Se mueve a la velocidad de Fermi en sentido contrario al momento  $\langle \mathbf{v}_- \rangle = -v_F \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}$ , y transporta también una densidad de corriente eléctrica  $\mathbf{j}_- = -ev_F \Psi_-^\dagger \sigma \Psi_- = e \frac{v_F}{LW} \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}$  en el mismo sentido que el momento. Tiene también una helicidad definida igual a  $-\frac{1}{2}$ , en sentido contrario al momento. Estos estados constituyen la *banda de valencia* en el grafeno sometido a un potencial externo constante  $U_o$ .

La estructura periódica de la red en el grafeno impone unas condiciones de contorno que limitan el número de momentos  $\mathbf{k}$  admisibles, y los convierte en un conjunto finito. Así, en cada banda hay un número finito de estados y un nivel de energía fundamental.

Además, existe un conjunto de propiedades que son características del grafeno como la fase de Berry, el zitterbewegung y la quiralidad.

### Fase de Berry

Berry [32] estableció que un autoestado en un sistema cuántico, que se transporta lentamente a lo largo de un circuito  $C$  variando los parámetros  $\mathbf{R}$  de su hamiltoniano  $\hat{H}(\mathbf{R})$ , adquirirá un factor de fase geométrico  $\exp[i\gamma(C)]$ . La fase de Berry aplicada al grafeno es la fase que un autoestado expresado en la Eq[1.20] adquiere después de que  $\mathbf{k}$  sea forzado a realizar un círculo cerrado *a energía constante* en torno a un punto de Dirac [33].

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad (1.20)$$

La fase de Berry se define como [34]:

$$\theta = -i \oint_C \langle \Psi(\mathbf{k}(t)) | \frac{\partial}{\partial t} | \Psi(\mathbf{k}(t)) \rangle dt \quad (1.21)$$

La integral tiene lugar a lo largo de un camino cerrado (círculo) a medida que evoluciona el tiempo. Aplicamos la ecuación Eq[1.21] al autoestado Eq[1.20]:

$$\theta = -i \oint_C dt \left[ \frac{1}{2} (1, e^{-i\phi}) \begin{pmatrix} 0 \\ i \frac{\partial \phi}{\partial t} e^{i\phi} \end{pmatrix} + i \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} \cdot \mathbf{r} + i \mathbf{k} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \right] \quad (1.22)$$

En la ecuación anterior Eq[1.22], el segundo y tercer término de la parte derecha de la igualdad son nulos al realizar la integración sobre un camino cerrado, por ello se reduce a:

$$\theta = \oint_C dt \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) = \frac{1}{2} \cdot 2\pi = \pi \quad (1.23)$$

### Zitterbewegung

El *zitterbewegung* (que podemos traducir por 'movimiento tembloroso') es un movimiento de vibración ultrarápido alrededor de la trayectoria clásica para un electrón que obedece la ecuación de Dirac. En 1930 E. Schrödinger propuso la existencia de este efecto, al analizar el movimiento de un paquete de ondas de electrones en el espacio libre que son solución de la ecuación relativista de Dirac.

De manera más formal, podemos decir que el *zitterbewegung* (*jittery*) es un movimiento teórico circular o helicoidal de electrones que obedecen la ecuación relativista de Dirac, el cual está provocado porque un electrón al moverse a velocidades relativistas puede engendrar su propia antipartícula y la interacción entre ambas provoca que en la trayectoria del electrón aparezca un movimiento tembloroso.

Esta interferencia produce que aparezca un movimiento de vibración ultrarápido a una velocidad muy elevada (del orden de la velocidad de la luz) alrededor de la posición del electrón dada, perpendicular a su trayectoria, con una determinada frecuencia angular  $2m_e c^2 / \hbar$  o aproximadamente  $1.6 \cdot 10^{21}$  Hz, y cuya amplitud es muy pequeña, del orden de la longitud de onda Compton. Este movimiento tembloroso surge porque no es posible localizar la función de onda de una partícula relativista en una distancia inferior a la longitud de onda Compton.

En el caso del grafeno, la antipartícula del electrón es un hueco, la longitud de onda Compton es del orden de 1 nm, y por tanto es posible detectar ese temblor utilizando un microscopio de alta resolución [35]. Otra perspectiva para el *zitterbewegung* en el caso del grafeno y desde el punto de vista de Física de la Materia Condensada, consiste en considerar que es un tipo especial de transición interbanda con la creación virtual de pares electrón-hueco [36]. También podemos considerarlo como un desorden intrínseco que da lugar a una conductividad mínima en el grafeno, incluso cuando la concentración de portadores se aproxima a un valor nulo [36].

### Helicidad

La helicidad se define como la proyección del operador momento a lo largo

de la dirección del pseudospin [14]. El operador de Mecánica Cuántica para la helicidad viene representado por la expresión Eq[1.24]

$$\hat{h} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \quad (1.24)$$

Los estados  $\Psi(\mathbf{r})$  son autoestados del operador  $\hat{h}$ , ya que:

$$\hat{h}\Psi(\mathbf{r}) = \pm \frac{1}{2}\Psi(\mathbf{r}) \quad (1.25)$$

donde los electrones tienen helicidad positiva, y los huecos helicidad negativa. En la Eq[1.25] representamos los dos autovalores de  $\hat{h}$ . El signo positivo o negativo depende de si  $\boldsymbol{\sigma}$  coincide con el sentido del movimiento, o es contrario a él.

Un sistema u objeto es *quiral* si se puede distinguir de su imagen espejular, es decir al superponerlos no dan el mismo resultado. La quiralidad está relacionada con la rotación - dextrógira o levógira - de una partícula mientras avanza en sentido lineal. Para partículas sin masa, como sucede en el grafeno, helicidad y *quiralidad* coinciden. Por ello, los estados del sistema próximos a los puntos de Dirac  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  tienen una helicidad o quiralidad bien definida.

## 1.4. Otros materiales 2D

Los *materiales nanoestructurados* poseen tamaños del orden de nanómetros en al menos alguna dimensión. Una buena clasificación de los materiales tiene en cuenta su dimensión (0D, 1D, 2D o 3D), y además su superficie libre [37]. Tradicionalmente los materiales eran 3D (tridimensionales), como la mayoría de los dispositivos de Electrónica. Sin embargo, en las dos últimas décadas han aparecido los materiales 2D (bidimensionales) como son los materiales laminados de un simple átomo de grosor, los 1D (unidimensionales) como las nanocintas (nanoribbons), nanotubos y nanohilos, e incluso los 0D (cero dimensionales) como los puntos cuánticos. La característica principal de los materiales es su *dimensionalidad*, pues caracteriza la estructura atómica del material, y también las propiedades de éste [38]. Así sucede que el mismo elemento químico o compuesto puede tener distintas propiedades dependiendo de las dimensiones que tenga el material. De momento, a día de hoy, las nanoestructuras basadas en carbono están entre los materiales más importantes en el campo de la Nanotecnología (tecnología que manipula materiales con escala de nanómetros).

La realización experimental del grafeno, y sus asombrosas propiedades ha propiciado que otros investigadores se lanzasen a la búsqueda de *otros materiales* también en dos dimensiones, como el disulfuro de molibdeno ( $\text{MoS}_2$ ), el nitruro de boro hexagonal (hBN), el estaneno, el siliceno, . . . Todo ello ha dado lugar al nacimiento de una *nueva* clase de materiales: los *materiales 2D* [39], que se caracterizan por poseer un grosor de una única capa de átomos. La causa de las *extrañas* propiedades de los materiales 2D se debe al *efecto de la dimensionalidad*, que da lugar a propiedades *diferentes* cuando el material constituyente, aún siendo el mismo, se encuentra en estado 3D, o bien aparece en estado 2D. La obtención de estos materiales en dos dimensiones, depende de la estructura molecular del material de partida en tres dimensiones, y de su estabilidad a temperatura ambiente.

Los materiales 2D son básicamente de dos tipos:

- Alótropos 2D de un elemento, como son los *Xenes* que son átomos que básicamente pertenecen al grupo IVA de elementos de la tabla periódica, y están organizados en una estructura de panal de abeja como el siliceno [40], germaneno [41], estaneno [42], borofeno [43] y fosforeno [44].
- Compuestos consistentes en dos o más elementos, como el nitruro de boro hexagonal y los TMD ( Transition Metal Dichalcogenides) que son atómicamente muy delgados, del tipo  $\text{MX}_2$ , donde un átomo metálico de transición  $M$  por ejemplo Mo, W es intercalado entre dos átomos de calcogenoides  $X$  por ejemplo S, Se, Te [45].

La familia de los cristales 2D incluye todo tipo de materiales conductores : metales ( ej.  $\text{NbSe}_2$ ), semiconductores ( ej.  $\text{MoS}_2$  [46]) y aislantes ( ej. nitruro de boro hexagonal - hBN) [47].

El siliceno, el germaneno y el estaneno forman parte de los cristales denominados 2D-Xenes, que son similares al grafeno pero con distinto grado de pandeo [48]. El nitruro de boro hexagonal es un protector atómico capaz de soportar tanto condiciones de calor como de oxidación. Los TMD tienen como característica que les diferencia del grafeno, poseer bandgap, y por tanto al ser semiconductores, son en principios buenos candidatos para aplicaciones en Electrónica y Optoelectrónica, incluso a temperatura ambiente.

La característica crítica para los materiales 2D es la *estabilidad* [49]. Hay materiales 2D estables a temperatura ambiente en forma de monocapa por ejemplo el grafeno, el ya mencionado hBN ( también llamado grafeno blanco),

el óxido de grafeno, y  $MoS_2$ ,  $WS_2$ ,  $MoSe_2$ ,  $WSe_2$  [50]. Otros son estables sólo en atmósferas inertes, o bien aún están por determinar.

Un campo dentro de los materiales 2D está constituido por las *heteroestructuras de van der Waals*. Éstas consisten en planos atómicos aislados de diferentes materiales, que son colocados capa a capa de manera precisa según la elección realizada, para constituir heteroestructuras [51]. Esto es posible ya que existen materiales con enlaces fuertes en el plano, y enlaces débiles en la dirección perpendicular, es decir entre diferentes capas, lo cual provoca que sea posible aislar esas capas que constituyen ahora, cada una de ellas, un material 2D, ya que en la dirección perpendicular únicamente tienen un átomo de grosor.

Una de las finalidades de estos materiales 2D es poder obtener transistores capaces de operar a temperatura ambiente [52], y así poder reducir el tamaño de los circuitos actuales. Los materiales 2D parecen candidatos adecuados para crear una nueva generación de dispositivos electrónicos, ya que permitirán un procesamiento relativamente fácil, acceso directo a los portadores de carga móviles, una movilidad muy elevada de los portadores de carga (a temperatura ambiente y a baja temperatura), alta conductividad termal, y un consumo de potencia mucho menor que el asociado a un transistor de silicio tradicional.

A raíz de las investigaciones realizadas sobre el grafeno, surgieron *técnicas*, como el crecimiento epitaxial [53], para preparar, detectar, transferir y caracterizar este material 2D, que posteriormente pudieron emplearse para los siguientes materiales 2D que fueron surgiendo. Así con una técnica ya desarrollada, el avance fue más rápido en estos últimos.

La implementación práctica de materiales 2D en bienes de consumo requiere un buen conocimiento para su realización en dispositivos reales, así como durabilidad en condiciones ambiente, y en condiciones extremas. Para ello es necesario realizar pruebas de esfuerzo eléctrico, termal, tiempo de vida, . . . Además para que el dispositivo funcione correctamente es necesario algún tipo de *protección* para estos materiales 2D. La clave para que la industria llegue a utilizar los materiales 2D es una producción a gran escala y a precios razonables.

Entre las posibles aplicaciones están la utilización del  $MoS_2$  para la realización de FETs de radio frecuencias [54]. Además con el rápido crecimiento en el mercado de una *electrónica de uso* y una amplia conectividad a Internet,

la necesidad de una *nanoelectrónica flexible* con alta velocidad de operación y bajo consumo se ha convertido en uno de los temas más investigados. Los cristales atómicos 2D de van der Waals son prometedores candidatos por sus cualidades de miniaturización, elevada flexibilidad mecánica y realización electrónica [55, 56].

## 1.5. Organización de la tesis

Esta tesis ha sido organizada en los siguientes capítulos:

En el capítulo 1 hemos comenzado justificando el título de la tesis, comentado datos históricos sobre el grafeno, y las propiedades más características desde el punto de vista electrónico, del grafeno y de otros materiales 2D.

En el capítulo 2 calculamos el coeficiente de transmisión para una lámina de grafeno de anchura indefinida sometida a una o dos barreras de potencial unidimensional obteniendo una expresión analítica cerrada. La relación entre el ángulo de incidencia y el de transmisión en una barrera de potencial depende de la energía del electrón incidente y de la altura de la barrera de potencial  $U_0$ , apareciendo un ángulo límite bajo ciertas condiciones. El coeficiente de transmisión resulta unitario para incidencia perpendicular, y también para otros ángulos que verifiquen ciertas condiciones, provocando que no pueda existir confinamiento de portadores de carga mediante una barrera de potencial eléctrico. El coeficiente de transmisión es mínimo, próximo a cero, para ciertos valores de los parámetros, de manera que podemos llegar a obtener un pseudogap de energía. El mismo modelo puede aplicarse al caso de dos barreras de potencial independientes. Al considerar dos barreras de potencial simétricas aparecen unos picos (tipo delta) de resonancia equiespaciados dentro del pseudogap.

En el capítulo 3 hemos construido un modelo para el transistor de efecto de campo del grafeno (GFET) que relaciona los potenciales exteriores aplicados en las puertas del dispositivo con los parámetros utilizados en nuestro modelo. Determinamos una expresión para la conductancia de los GFET bajo ciertas condiciones experimentales, en particular para temperaturas próximas a cero kelvin, y baja polarización. En principio, consideramos incidencia no-perpendicular, para evitar la paradoja de Klein. Inicialmente los portadores pueden proceder de todas las direcciones posibles y además llegar a impactar en la barrera de potencial con la misma probabilidad. A continua-

ción, tratamos el caso de direcciones privilegiadas, es decir que tienen más probabilidad de proceder de esas direcciones que de otras, lo cual simulamos mediante funciones de ponderación tipo campana de Gauss o tipo delta. Físicamente, esta dispersión que puede suceder al considerar direcciones privilegiadas, la asociamos a muestras con pocas o bastantes inhomogeneidades.

En el capítulo 4 realizamos una extensión del capítulo 2, aplicando múltiples barreras de potencial a una lámina de grafeno. En vez de obtener una expresión analítica cerrada, utilizamos el Método de la Matriz de Transferencia (MMT). Analizamos el caso de múltiples barreras de potencial de alturas iguales o diferentes. Como aplicación, también consideramos la barrera de potencial escalonada que permite simular cualquier potencial que varíe suavemente, aplicándolo a continuación a una función gaussiana.

En el capítulo 5 realizamos otra extensión del capítulo 2, con el fin de mejorar y refinar nuestro modelo, para lo cual consideraremos que sobre la lámina de grafeno además de influir las barreras de potencial asociadas a las puertas superiores  $V_{TG}$ , también lo hace el campo eléctrico asociado a la diferencia de potencial entre surtidor y drenador  $V_{DS}$ , dando lugar a un *potencial efectivo lineal* en ciertas regiones de la lámina de grafeno. Lo anterior cambia el potencial y por tanto el Hamiltoniano, lo que nos lleva a construir de nuevo los estados electrónicos en los que es necesario introducir funciones de Hermite e hipergeométricas. Al someter dos barreras de potencial a campo eléctrico aparecen nuevos efectos. El *orden que ocupan* las distintas barreras de potencial influye de tal forma que la segunda barrera de potencial puede llegar a quedar *enmascarada*.

En el capítulo 6, consideramos una nanocinta de grafeno (GNR) de longitud infinita pero de anchura finita, que sufre a continuación un estrechamiento. La conductancia básicamente viene dada a partir del número de modos que se propagan en la parte estrecha de la cinta, para lo cual comparamos la conductancia de la cinta que ha sufrido estrechamiento con la asociada a una cinta cuya anchura coincidiese con la parte más estrecha. En esta reducción progresiva de las dimensiones, consideramos una *nanoconstricción rectangular* en la nanocinta de grafeno, con un doble propósito: comparar por una parte nuestros resultados analíticos con los que para una cinta idéntica obtienen mediante el método tight-binding nuestros colegas de la Universidad Complutense de Madrid y, por otro, con las medidas que realizan en el centro de I+D+i de la Universidad de Salamanca nuestros colegas experimentales sobre una nanoconstricción en una nanocinta construida expresamente para ello.

## Introducción

---

Las ventajas que presentaba el método tight-binding de ser escalable y poder definir muy fácilmente la forma de los bordes, junto con una inesperada lenta convergencia del coeficiente de transmisión analítico hizo aconsejable finalmente utilizar este último método para realizar la comparación con las medidas experimentales.



## Capítulo 2

# Cálculo analítico del coeficiente de transmisión a través de una y dos barreras de potencial

### 2.1. Introducción

La transmisión electrónica a través de una o dos barreras de potencial, con distintas formas, en grafeno ha dado lugar a trabajos que tratan el fenómeno en modo diverso. El estudio de una barrera de potencial en una monocapa de grafeno para una partícula ultrarrelativista (sin masa) fue estudiado por Katsnelson y col. en [57], donde caracterizan el coeficiente de transmisión mediante una fórmula simplificada. Nguyen y col. en [58] utilizan el método standard de la matriz-T para estimar numéricamente la probabilidad de transmisión en una barrera unidimensional con formas diversas. Los fenómenos de transporte en el grafeno han sido también estudiados por diversos autores en [59–64] donde se justifica el efecto túnel de Klein y se obtiene el coeficiente de transmisión a través de una barrera de potencial. Adam y col. en [65] han considerado el papel de las impurezas cargadas y la concentración en que éstas aparecen, que originan la dispersión de portadores de su dirección de propagación, y por tanto afecta de manera importante al transporte. La transmisión electrónica resonante a través de una doble barrera se ha considerado en [66,67], y en [68] por medio de las funciones de Green asociadas.

Pretendemos estudiar el comportamiento de algunos dispositivos electrónicos cuando se sustituyen los semiconductores convencionales por grafeno monocapa. En particular, nos interesa estudiar el comportamiento de diversos

transistores de efecto de campo FET, que mediante un arreglo experimental adecuado y haciendo uso de diferentes potenciales de puerta, someten al grafeno a potenciales externos que pueden ser simulados de distintos modos. En la aproximación más sencilla, consideramos que dicho potencial es asimilable a una o dos barreras de potencial. Los electrones de conducción, caracterizados en la aproximación continua de baja energía como partículas ultrarrelativistas de Dirac, se transmitirían a través de los estados disponibles del grafeno sometido a estos potenciales. Desde los trabajos de Landauer [69] es conocido que el transporte coherente de corriente en estos dispositivos está determinada por la *probabilidad de que un electrón pueda transmitirse a través de él*. Nuestro primer objetivo es obtener una expresión analítica exacta del *coeficiente de transmisión*  $T$  para estos potenciales, que servirá para discutir la influencia de las magnitudes que intervienen en el fenómeno: energía y ángulo de incidencia de los portadores, altura(s) de la(s) barrera(s), longitud y separación de éstas y construir después, en el régimen lineal, la *conductancia del dispositivo*.

## 2.2. Coeficiente de transmisión para una barrera de potencial

Consideramos una *lámina de grafeno monocapa* idealmente infinita sometida a una barrera de potencial finita. La lámina se considera lo *suficientemente extensa* tanto en la dirección  $x$  como en la dirección  $y$ , como para poder ignorar los efectos de borde. Esta aproximación desacopla completamente el movimiento electrónico, y convierte en idéntico el transporte de los electrones en los dos valles del grafeno, de modo que, para construir la conductancia del dispositivo o la intensidad de corriente, basta con considerar uno de ellos, el valle  $\mathbf{K}$  por ejemplo, y multiplicar el resultado por 2. Una barrera de energía potencial unidimensional, representada en la figura Fig. 2.1, en el plano  $x - y$  está descrita por:

$$U(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < a \\ U_0 & \text{si } a < x < a + L \\ 0 & \text{si } a + L < x \end{cases} \quad (2.1)$$

Ya que la energía potencial y el potencial eléctrico están relacionados mediante  $U = q \cdot V$ , siendo  $q$  la carga del portador que será  $-e$  para el electrón y  $+e$  para el hueco, donde  $e$  representa la carga elemental. Por simetría, podíamos haber puesto la barrera de potencial centrada en el origen. Sin

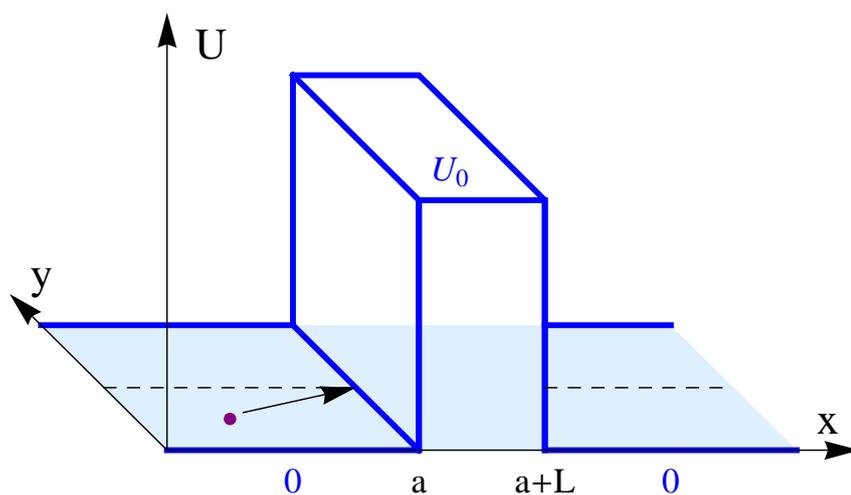


Figura 2.1: Barrera de potencial unidimensional de altura  $U_0$  y anchura  $L$ .

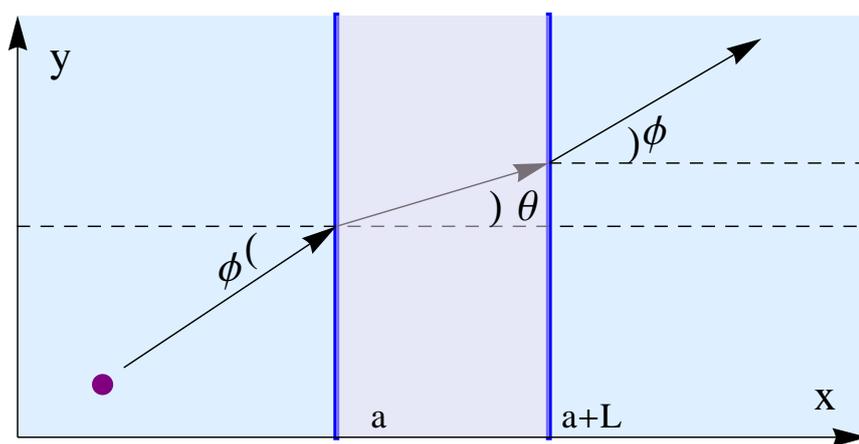


Figura 2.2: Ángulos de incidencia  $\phi$  y de transmisión  $\theta$ , al impactar sobre la barrera de potencial.

embargo, se ha desplazado para tener un resultado más general, directamente aplicable a dos barreras de potencial. Naturalmente, nuestros resultados demuestran de manera expresa la independencia del fenómeno frente a la posición de la barrera.

El hamiltoniano a resolver es entonces:

$$H = v_F(\sigma_x \hat{P}_x + \sigma_y \hat{P}_y + U(x, y) \hat{I}) = v_F \begin{pmatrix} U(x, y) & \hat{P}_- \\ \hat{P}_+ & U(x, y) \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

donde  $\hat{P}_- = \hat{P}_x - \hat{P}_y$  y  $\hat{P}_+ = \hat{P}_x + \hat{P}_y$ . La solución del hamiltoniano anterior adopta una forma funcional diferente en cada una de las regiones determinadas por el potencial. Para construir los estados posibles conviene tener en cuenta algunos aspectos:

1.- El hamiltoniano es independiente del tiempo, y por tanto *la energía es una constante del movimiento*. Así, los estados deben tener una misma energía fija  $E$  en todas las regiones.

En las regiones extremas donde el electrón es libre, regiones *I* y *III*, el módulo del momento debe ser  $|\vec{k}| = k = \pm \frac{E}{\hbar v_F}$ , con signo positivo para la banda de conducción, o negativo para la banda de valencia. Por otra parte, en la región de la barrera, región *II*, el momento debe ser diferente, puesto que debe tener en cuenta la energía asociada a la barrera de potencial. Su valor es  $|\vec{q}| = q = \pm \frac{E-U_0}{\hbar v_F}$ , según sea el signo de  $E - U_0$ . Esto significa que, para el caso considerado, en las regiones donde la energía potencial es nula (*I* y *III*) pueden propagarse indistintamente estados con energía positiva o negativa, es decir tanto de la banda de conducción como de la banda de valencia. En la región *II* en la cual tenemos barrera de potencial, en cambio hay que considerar varios casos:

- Cuando  $E > U_0 > 0$ , sólo existe un valor físicamente aceptable para el momento (en módulo) si se elige el signo positivo en la ecuación  $q = \pm \frac{E-U_0}{\hbar v_F}$ , que corresponde a un estado de la banda de conducción. En este caso, los electrones se propagan en todas las regiones por la banda de conducción.
- Cuando  $U_0 > E > 0$ , debe elegirse en cambio el signo negativo en la ecuación  $q = \pm \frac{E-U_0}{\hbar v_F}$ , correspondiendo a un estado de la banda de valencia. En este caso, los electrones que se propagan por la banda de conducción en la región libre (zonas extremas) sólo pueden propagarse en la zona intermedia por la banda de valencia. Por tanto se comportan como huecos. Existe así un cambio en el comportamiento, ya que se

comportan como electrones en las zonas extremas (*I* y *III*), y como huecos en la zona intermedia (*II*).

- Cuando  $E < 0$ , los electrones sólo pueden propagarse por la banda de valencia en todas las regiones. Es decir, se comportarán como huecos.

2.- El potencial es independiente de  $y$ , por tanto la *componente*  $k_y$  del vector de onda debe ser *la misma* en las diferentes regiones del espacio.

Sin embargo,  $k_x$  toma distintos valores dependiendo de la zona en que se encuentre. En las zonas extremas *I* y *III* es  $k_x = \pm \sqrt{\frac{E^2}{\hbar^2 v_F^2} - k_y^2}$ , mientras que en la zona intermedia *II* es  $q_x = \pm \sqrt{\frac{(E-U_0)^2}{\hbar^2 v_F^2} - k_y^2}$ . Donde el signo positivo está asociado a ondas incidentes propagándose hacia la derecha, y el negativo a ondas reflejadas propagándose hacia la izquierda. Tanto  $k_x$  como  $q_x$  pueden ser reales o imaginarios, dando lugar, respectivamente a ondas propagantes o no propagantes, eventualmente evanescentes.

Este comportamiento puede interpretarse en términos de las leyes de Snell de reflexión y refracción de ondas. Un electrón incidente con un ángulo  $\Phi$ , en cada región deben cumplir:

- El ángulo de incidencia (formado por el rayo incidente y la normal)  $\Phi$  es igual al ángulo de reflexión  $\Phi'$  (formado por el rayo reflejado y la normal).
- El ángulo de incidencia  $\Phi$  y el ángulo de transmisión  $\Theta$  (formado por el rayo transmitido y la normal) verifican:

$$k_y = k \sin \Phi = q \sin \Theta, \quad |E| \sin \Phi = |E - U_0| \sin \Theta \quad (2.3)$$

- Para determinadas energías, existe un ángulo de incidencia límite tal que la partícula se transmite a  $90^\circ$ . Para ángulos de incidencia superiores, la componente  $x$  del momento transmitido se torna imaginaria, lo que origina que las ondas planas de los electrones incidentes se conviertan en ondas evanescentes, descritas por exponenciales reales. El *ángulo límite* está establecido por la condición

$$\Phi_l = \arcsin \left| 1 - \frac{U_0}{E} \right| \quad (2.4)$$

De este modo, los electrones con energía inferior a  $0.5 U_0$  no pueden sufrir reflexión total en la barrera y se transmiten con un ángulo de transmisión inferior al de incidencia, es decir, se acercan a la normal; los electrones con energía igual a  $0.5 U_0$  se transmiten con un ángulo de transmisión igual al de incidencia, y los electrones con energía superior a  $0.5 U_0$  sólo pueden transmitirse por medio de una onda plana si el ángulo de incidencia  $\Phi$  está comprendido entre los valores  $-\Phi_l$  y  $\Phi_l$  correspondientes al valor de su energía. Cuando lo hacen, se alejan de la normal. En particular, para una energía  $E = U_0$ , el ángulo límite es nulo, por lo que sólo hay ondas planas transmitidas en el interior de la barrera para incidencia normal. Todo este comportamiento se recoge en las Fig. 2.3 - 2.4.

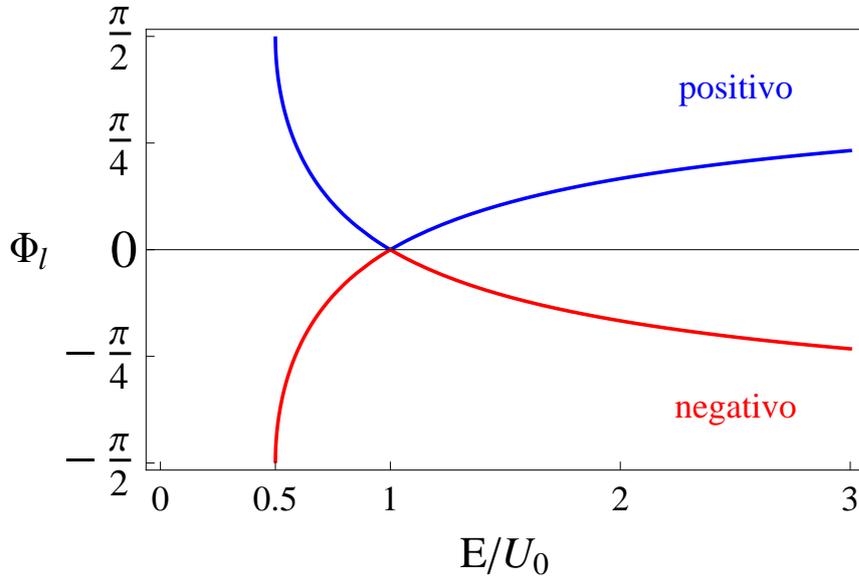


Figura 2.3: Representación del ángulo límite  $\Phi_l$  frente a  $E/U_0$ , tanto para ángulos positivos como negativos. Observamos que no existe ángulos de incidencia límite para valores inferiores a 0.5, y además para 1 alcanza su valor mínimo.

En la figura Fig. 2.3 se representa el ángulo límite  $\Phi_l$  frente a  $E/U_0$ , tanto para ángulos límite positivos como negativos. Se observa claramente en dicha figura que para valores inferiores a  $E/U_0 = 0.5$  no existe ángulo de incidencia límite. Éste decae hasta que alcanza el valor  $E/U_0 = 1$ , a partir del cual comienza a crecer de nuevo. Del mismo modo, en las figuras Fig. 2.4 se observa la relación entre el ángulo de incidencia y el de transmisión para diferentes energías, en (a) para energías inferiores

a  $0.5 U_0$ , y en (b) para energías superiores a  $0.5 U_0$ . Cuanto menor es  $E/U_0$ , menor será el ángulo de transmisión con respecto al de incidencia y viceversa.

De acuerdo con las consideraciones anteriores, la función de onda de energía  $E$  para el potencial en la ecuación Eq[2.1] puede ser expresada mediante el espinor de Dirac:

$$\Psi_I(x, y, t) = \frac{e^{i(k_y y - \frac{E}{\hbar} t)}}{\sqrt{2LW}} \left\{ e^{ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ s \frac{k_+}{k} \end{pmatrix} + r e^{-ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ -s \frac{k_-}{k} \end{pmatrix} \right\} \quad (2.5)$$

$$\Psi_{II}(x, y, t) = \frac{e^{i(k_y y - \frac{E}{\hbar} t)}}{\sqrt{2LW}} \left\{ A e^{iq_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ s_1 \frac{q_+}{q} \end{pmatrix} + B e^{-iq_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ -s_1 \frac{q_-}{q} \end{pmatrix} \right\} \quad (2.6)$$

$$\Psi_{III}(x, y, t) = \frac{e^{i(k_y y - \frac{E}{\hbar} t)}}{\sqrt{2LW}} t e^{ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ s \frac{k_+}{k} \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

$$(2.8)$$

donde se ha denotado  $s = \text{sign}(E)$ ,  $s_1 = \text{sign}(E - U_0)$ ,  $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$ ,  $q_{\pm} = q_x \pm ik_y$ ,  $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$  y  $q = \sqrt{q_x^2 + k_y^2}$ . Además se ha normalizado la función de modo que haya un electrón incidente en el sistema por unidad de superficie. Se ha considerado también que los electrones que inciden en el sistema desde la izquierda, pueden reflejarse o transmitirse en las zonas  $I$  y  $II$ , pero en la región  $III$ , una vez atravesada la barrera, sólo quedan partículas propagándose hacia la derecha. Además, se ha supuesto también que el ángulo de incidencia es inferior al ángulo límite  $\phi < \phi_l$ . De no ser así, tendríamos en cuenta lo anterior.

En las heteroestructuras semiconductoras los electrones obedecen la ecuación de Schrödinger que es de segundo grado, y la continuidad de la densidad de corriente en la interfaz entre dos regiones contiguas del potencial, lo cual implica dos condiciones de contorno : la continuidad de la función de onda y la de su derivada en la mencionada interfaz [70]. En el grafeno, la ecuación de propagación es la de Dirac, que es de primer grado, por lo que será suficiente con imponer la continuidad de las funciones de onda, que ahora implica la continuidad de la corriente. En nuestro caso, las funciones de onda deben verificar la condición de *continuidad de la función de onda en la frontera* entre zonas adyacentes. De este modo, se debe cumplir en todo instante:

$$\Psi_I(a, y, t) = \Psi_{II}(a, y, t), \quad (2.9)$$

$$\Psi_{II}(a + L, y, t) = \Psi_{III}(a + L, y, t) \quad (2.10)$$

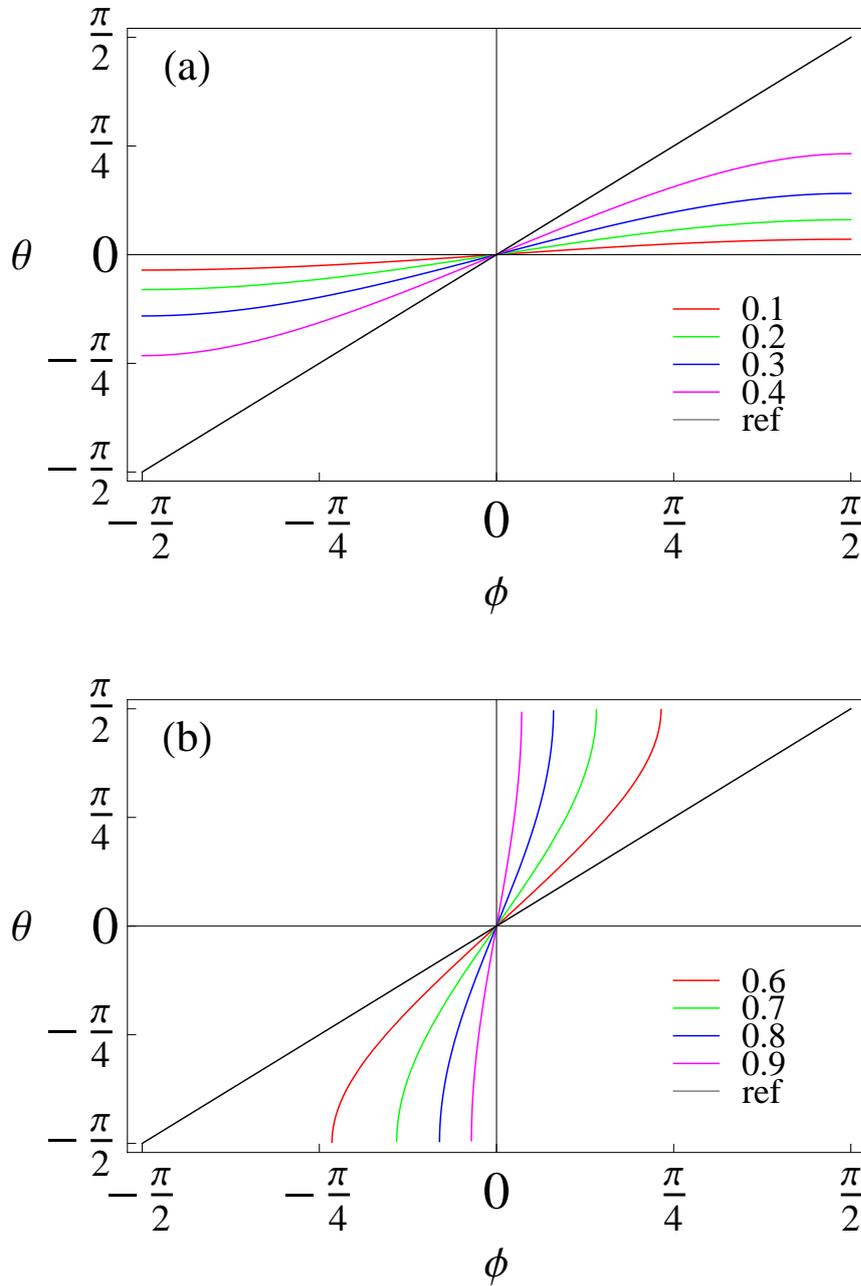


Figura 2.4: Ángulo de transmisión  $\Theta$  frente al ángulo de incidencia  $\Phi$  para diferentes valores de  $E/U_0$ . La línea gris representa  $\Theta = \Phi$ . A medida que disminuye  $E/U_0$ , menor será el ángulo de transmisión con respecto al de incidencia; mientras que a medida que aumente, sucederá lo contrario.

tal y como habíamos obtenido en nuestro artículo [71], lo cual proporciona los coeficientes

$$r = \frac{-e^{i2ak_x} k_y k_+ (k - ss_1 q) \sin(Lq_x)}{k(k_x q_x \cos(Lq_x) + i(k_y^2 - ss_1 kq) \sin(Lq_x))} \quad (2.11)$$

$$A = \frac{e^{ia(k_x - q_x)} e^{-iLq_x} k_x (kq_- + ss_1 qk_+)}{2k(k_x q_x \cos(Lq_x) + i(k_y^2 - ss_1 kq) \sin(Lq_x))} \quad (2.12)$$

$$B = \frac{e^{ia(k_x + q_x)} e^{iLq_x} k_x (kq_+ - ss_1 qk_+)}{2k(k_x q_x \cos(Lq_x) + i(k_y^2 - ss_1 kq) \sin(Lq_x))} \quad (2.13)$$

$$t = \frac{e^{-ik_x L} k_x q_x}{k_x q_x \cos(Lq_x) + i(k_y^2 - ss_1 kq) \sin(Lq_x)} \quad (2.14)$$

En el tratamiento de la corriente suele interesar obtener el coeficiente de reflexión y el de transmisión en una dirección determinada. En nuestro caso en la dirección  $x$ , de acuerdo con la definición del potencial dada en la ecuación Eq[2.1]. El coeficientes de reflexión  $R$ , que es la probabilidad de que una partícula sea reflejada, y el coeficiente de transmisión  $T$ , que es la probabilidad de que una partícula sea transmitida, vienen definidos por el cociente entre la densidad de corriente reflejada o transmitida, y la densidad de corriente incidente:  $R = \left| \frac{J_{ref}}{J_{inc}} \right| = \left| \frac{\Psi_{ref}^+ \sigma_x \Psi_{ref}}{\Psi_{inc}^+ \sigma_x \Psi_{inc}} \right|$  y  $T = \left| \frac{J_{trans}}{J_{inc}} \right| = \left| \frac{\Psi_{trans}^+ \sigma_x \Psi_{trans}}{\Psi_{inc}^+ \sigma_x \Psi_{inc}} \right|$ .

En nuestro caso, tales coeficientes son

$$R = rr^* = \frac{k_y^2 (q - ss_1 k)^2 \sin^2(Lq_x)}{k_x^2 q_x^2 \cos^2(Lq_x) + (k_y^2 - ss_1 kq)^2 \sin^2(Lq_x)} \quad (2.15)$$

$$T = tt^* = \frac{k_x^2 q_x^2}{k_x^2 q_x^2 \cos^2(Lq_x) + (k_y^2 - ss_1 kq)^2 \sin^2(Lq_x)} \quad (2.16)$$

Los coeficientes de reflexión  $R$  y de transmisión  $T$  deben obedecer la ley de conservación de las partículas; es decir  $R + T = 1$ . El coeficiente de transmisión, que coincide con el descrito en [14], es *simétrico* respecto al ángulo de incidencia  $T(\phi) = T(-\phi)$ , lo cual significa que es independiente del sentido de incidencia de los electrones. En particular, para un ángulo de incidencia nulo (es decir, incidencia perpendicular a la barrera de potencial), el coeficiente de transmisión es la unidad. La barrera es transparente para todos los electrones que incidan perpendicularmente a ella independientemente del valor de su energía. Este fenómeno ya conocido para la ecuación de Dirac se le conoce como *paradoja de Klein* [15, 57, 59]. Esto no ocurre en los materiales semiconductores para electrones no relativistas, en los cuales el coeficiente de

transmisión para energías inferiores a la altura de la barrera de potencial es siempre menor que la unidad [72]. La barrera también es transparente para aquellos electrones con  $q_x = \frac{n\pi}{L}$ , es decir cuya energía y ángulo de incidencia verifiquen

$$\left(\frac{n\pi\hbar v_F}{L}\right)^2 = (E - U_0)^2 - E^2 \sin^2 \phi \quad (2.17)$$

Debido al coeficiente de transmisión unitario tanto para incidencia normal, como para los ángulos incidentes que verifiquen la condición expresada en la fórmula Eq[2.17], *no permite el confinamiento* de los portadores de carga *mediante barreras de potencial eléctrico*. Ya que al menos para ciertos ángulos, los portadores de carga están deslocalizados en el material. Esto es así, mientras no se abra un intervalo prohibido (gap) mediante algún procedimiento [73]. Se ha considerado hasta aquí, al analizar las características de la barrera de potencial, que los electrones inciden con un ángulo inferior al ángulo límite. Si lo hacen con un ángulo superior, el análisis sigue siendo válido, y el único cambio que se ha de realizar en las fórmulas anteriores es cambiar  $q_x$  por  $iq_x$ , lo que transforma las ondas planas  $e^{\pm iq_x x}$  en ondas *evanescentes*  $e^{\mp q_x x}$ . Así, en el interior de la barrera, el transporte de electrones no contiene términos oscilatorios sino exponenciales reales. En cuanto a los coeficientes, se ha de cambiar  $\cos(Lq_x)$  por  $\cosh(Lq_x)$  y  $\sin(Lq_x)$  por  $i \sinh(Lq_x)$ . En particular, el coeficiente de transmisión resulta en este caso

$$T = \frac{k_x^2 q_x^2}{k_x^2 q_x^2 \cosh^2(Lq_x) + (k_y^2 - s s_1 k q)^2 \sinh^2(Lq_x)} \quad (2.18)$$

Así, el coeficiente de transmisión dependiente del ángulo de incidencia, con respecto al valor del ángulo límite, se puede expresar explícitamente:

- Si  $\phi \leq \phi_l$

$$T = \frac{1}{1 + \tan^2 \phi \frac{\sin^2 \left\{ \frac{LU_0}{\hbar v_F} \sqrt{\left(\frac{E}{U_0} - 1\right)^2 - \left(\frac{E}{U_0}\right)^2 \sin^2 \phi} \right\}}{\left(\frac{E}{U_0} - 1\right)^2 - \left(\frac{E}{U_0}\right)^2 \sin^2 \phi}} \quad (2.19)$$

- Si  $\phi \geq \phi_l$

$$T = \frac{1}{1 + \tan^2 \phi \frac{\sinh^2 \left\{ \frac{LU_0}{\hbar v_F} \sqrt{\left(\frac{E}{U_0}\right)^2 \sin^2 \phi - \left(\frac{E}{U_0} - 1\right)^2} \right\}}{\left(\frac{E}{U_0}\right)^2 \sin^2 \phi - \left(\frac{E}{U_0} - 1\right)^2}} \quad (2.20)$$

Estos valores exactos, se reducen para valores elevados de la barrera de potencial a los valores aproximados para el coeficiente de transmisión considerado en [14]. Sin embargo, hay que mencionar que para valores no tan altos, la diferencia entre ambas expresiones puede ser significativa.

El coeficiente de transmisión depende de cuatro variables, dos asociadas a la partícula incidente: su energía  $E$  y su ángulo de incidencia  $\phi$ , y dos asociadas a la barrera de potencial: su altura  $U_0$  y su anchura  $L$ . Según aparecen en las ecuaciones Eq[2.19, 2.20], las variables anteriores se pueden agrupar en la energía relativa  $\frac{E}{U_0}$ , adimensional, el producto  $L \cdot U_0$  que se expresa en  $eV \cdot nm$ , y el ángulo de incidencia  $\phi$ .

En la figura Fig. 2.5 representamos el coeficiente de transmisión frente al ángulo de incidencia para los parámetros  $L \cdot U_0 = 5, 10, 15$  y  $20 eV \cdot nm$ . En (a) para  $E/U_0 = 0.3$  y en (b) para  $E/U_0 = 0.8$ . Se aprecia en ambos que, para una energía fija, el coeficiente de transmisión tiende a decrecer más o menos abruptamente a medida que aumenta el ángulo de incidencia. Cuando el producto  $L \cdot U_0$  es suficientemente grande empiezan a aparecer las resonancias descritas en la fórmula Eq[2.17]. Se observa en (a) que los valores de energía  $E/U_0 < 0.5$  se transmiten sin decaer abruptamente, cualquiera que sea el ángulo de incidencia. Cuando  $E/U_0 > 0.5$  en cambio, la existencia del ángulo límite dependiente de la energía es evidente como observamos en (b).

En la figura Fig. 2.6 representamos el coeficiente de transmisión frente a la energía relativa  $E/U_0$  para los parámetros  $L \cdot U_0 = 0.5, 1, 1.5$  y  $2 eV \cdot nm$ . En (a) para  $\phi = \pi/12$  y en (b) para  $\phi = \pi/4$ . En ambas figuras se aprecia que, para un ángulo de incidencia fijo, el coeficiente de transmisión es simétrico en torno al eje  $E = U_0 \cos^{-2} \phi$ , lo que significa que estados de la banda de valencia con energía  $E = (\cos^{-2} \phi - \xi)U_0$  y estados de la banda de conducción con energía  $E = (\cos^{-2} \phi + \xi)U_0$  tienen la misma probabilidad de transmitirse.

Siempre que el ángulo de incidencia sea suficientemente grande, el coeficiente de transmisión empieza a decrecer desde  $T = [1 + [LU_0/(\hbar v_F)]^2 \tan^2 \phi]^{-1}$  en  $E_1 = (1 + \sin |\phi|)^{-1}U_0$  pasando por un mínimo de transmisión  $T = \cosh^{-2}[LU_0 \tan \phi/(\hbar v_F)]$  en  $E = \cos^{-2} \phi U_0$  y vuelve a recuperar su valor inicial en  $E_2 = (1 - \sin |\phi|)^{-1}U_0$ . En la práctica, aparece un intervalo de energía de  $\Delta E = 2U_0 \sin |\phi| \cos^{-2} \phi$  en torno al eje de simetría, para el cual la probabilidad de transmitir un electrón decrece prácticamente a cero, es decir, es una zona de baja transmitividad que de aquí en adelante denominaremos *pseudogap*. Puesto que  $\sin |\phi|$  está comprendido entre 0 y 1, por tanto  $E_1$  puede variar entre  $U_0$  y  $U_0/2$  mientras que  $E_2$  puede variar entre  $U_0$  y  $\infty$ . Al representar la variación relativa de ese pseudogap de energía  $\Delta E/U_0$

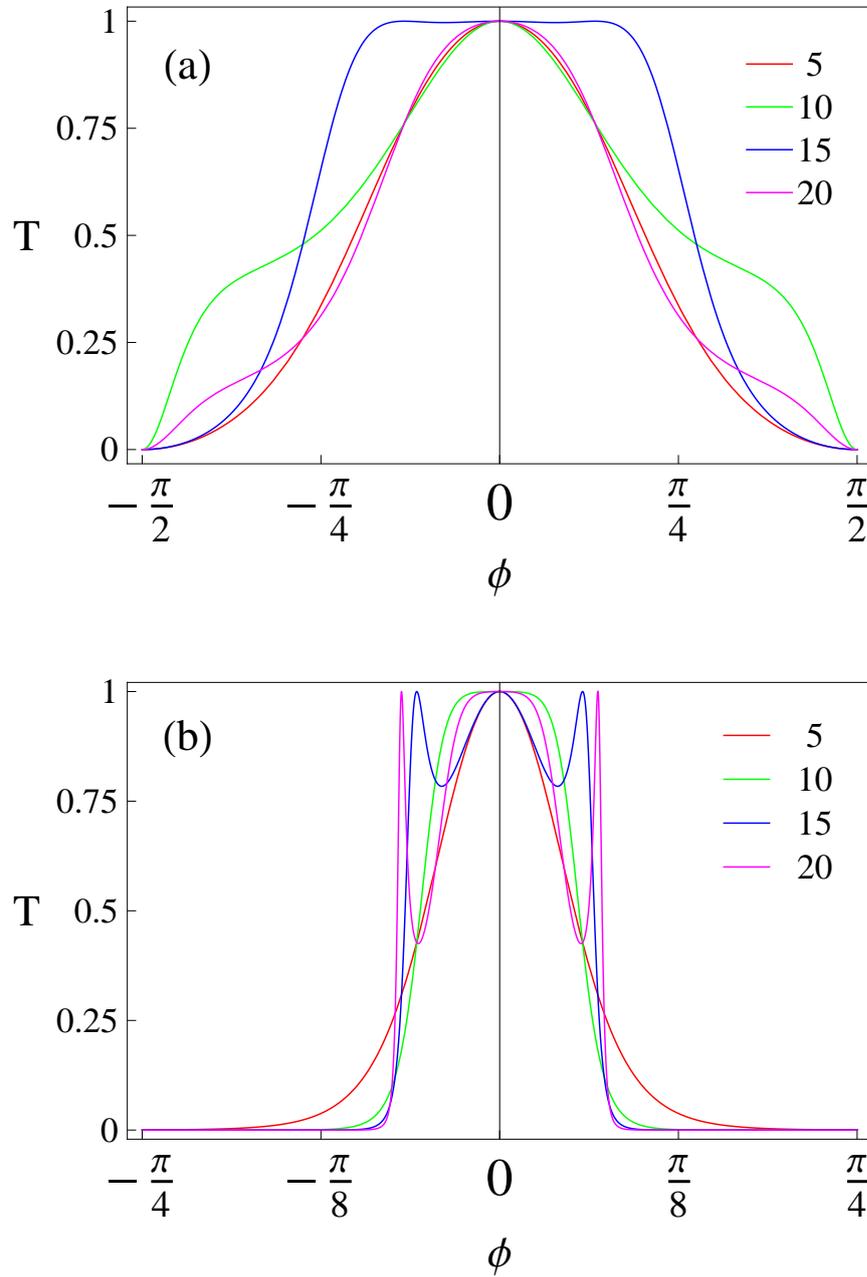


Figura 2.5: Coeficiente de transmisión en función del ángulo de incidencia siendo  $E/U_0 = 0.3$  (a) (  $0.8$  (b) ), para distintos valores de  $L \cdot U_0$  (eV·nm). En (a), al ser  $E/U_0$  inferior a  $0.5$  el coeficiente de transmisión decae suavemente para todos los ángulos, mientras que en (b), al ser  $E/U_0$  superior a  $0.5$  decaerá abruptamente.

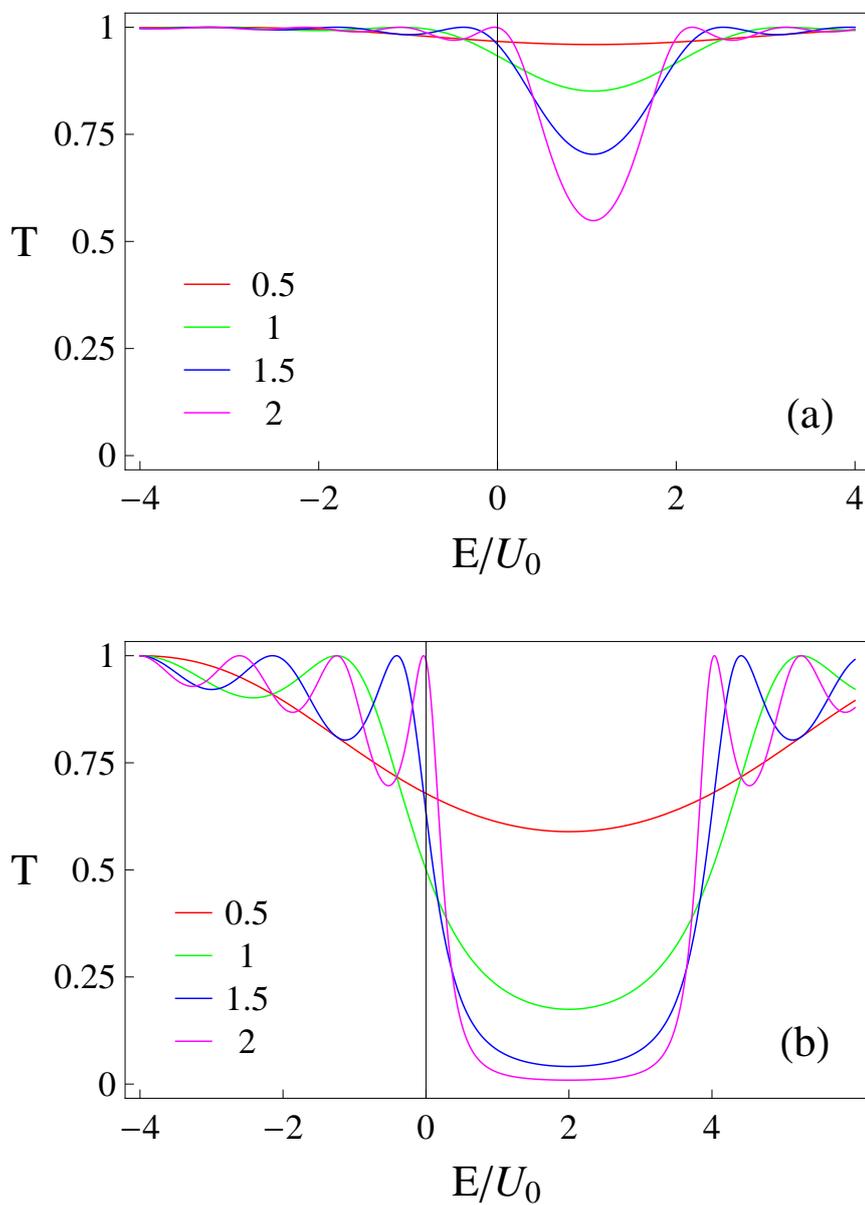


Figura 2.6: Coeficiente de transmisión frente a la energía relativa  $E/U_0$  para un ángulo de incidencia fijo  $\phi = \pi/12$  en (a) ( $\pi/4$  en (b)), y distintos parámetros  $L \cdot U_0$  (eV · nm). Existe un eje de simetría para  $E = U_0 \cos^{-2} \phi$ , en torno al cual para ángulos suficientemente elevados aparece un *pseudogap*.

frente al ángulo de incidencia  $\phi$  en la figura Fig. 2.7, observamos para ángulos pequeños la variación del pseudogap es muy pequeña, mientras que en torno a  $3\pi/8$  se presenta una variación muy acusada, tanto mayor cuanto mayor sea el ángulo.

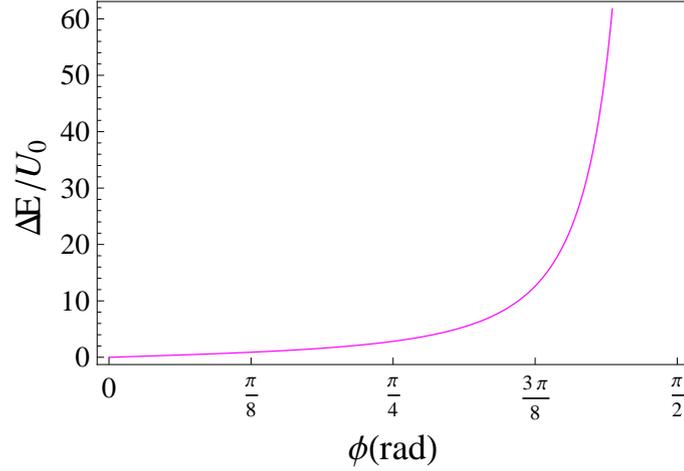


Figura 2.7: Anchura relativa del pseudogap  $\Delta E/U_0$  frente al ángulo de incidencia. Observamos una variación muy acusada para ángulos elevados.

Puesto que en muchos experimentos se controla la altura de la barrera de potencial por medio de un potencial de puerta aplicado al dispositivo, resulta interesante ver cómo se comporta el sistema para valores diferentes de dicha energía potencial que, resulta fácilmente sintonizable al ser una variable que se controla externamente. En la figura Fig. 2.8 se representan las líneas de nivel del coeficiente de transmisión  $T$  para valores de 0.1 (amarillo), 0.3 (naranja), 0.5 (rojo), 0.7 (verde) y 0.9 (azul) frente a la anchura  $L$  y a la altura  $U_0$  de la barrera, teniendo como parámetros en el panel izquierdo  $E = 0.1$  eV y  $\phi = \pi/12$  y en el panel derecho  $E = 0.3$  eV y  $\phi = \pi/6$ . Observamos que a partir de una cierta anchura  $L$ , que dependerá de los valores de los parámetros considerados  $E$  y  $\phi$ , aparece un *pasillo* asociado al *pseudogap* que está centrado en torno a un valor de  $U_0$  semejante a la energía incidente  $E$ , y que es tanto más ancho, cuanto mayor sea el ángulo de incidencia  $\phi$ .

El caso de un pozo de potencial  $U_0 < 0$  también puede ser tratado de modo análogo a la barrera de potencial. Esencialmente se encuentran los mismos resultados. Los coeficientes  $r$ ,  $A$ ,  $B$  y  $t$  son formalmente los mismos que los obtenidos para la barrera. En particular, el coeficiente de transmisión  $T$  es idéntico al que hemos dado en la en la fórmula Eq[2.18] para la barrera.

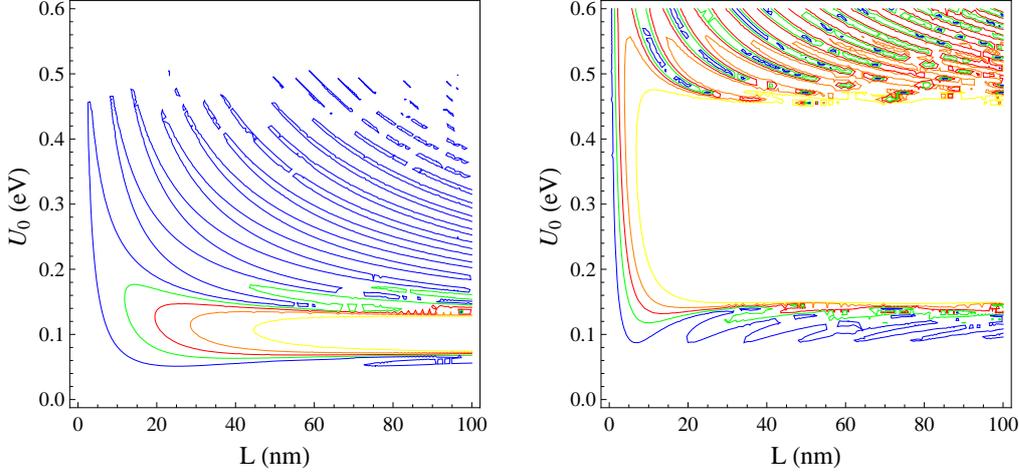


Figura 2.8: Líneas de nivel correspondientes a  $T = 0.1$  (amarillo),  $0.3$  (naranja),  $0.5$  (rojo),  $0.7$  (verde) y  $0.9$  (azul). En el panel izq. para  $E = 0.1$  eV y  $\phi = \pi/12$ , y en el dcho. para  $E = 0.3$  eV y  $\phi = \pi/6$ . Observamos un pasillo asociado al pseudogap, centrado en torno a  $U_0 \sim E$ , y cuya anchura aumentará con el ángulo de incidencia  $\phi$ .

La única diferencia que existe es el valor negativo de  $U_0$ . Nótese que el coeficiente de transmisión cumple  $T(E, U_0) = T(-E, -U_0)$ , que al aplicarlo a los electrones del grafeno, significa que la probabilidad de transmisión de un electrón de la banda de conducción a través de una barrera de potencial de altura determinada, es la misma que la de un electrón de la banda de valencia con energía opuesta, a través de un pozo potencial cuya profundidad sea igual a la altura de la barrera anterior. Como consecuencia, las propiedades de conducción eléctrica del grafeno dopado  $n$  y el dopado  $p$  son idénticas, salvo en lo relativo al signo de los portadores.

### 2.3. Coeficiente de transmisión a través de dos barreras de potencial

Consideramos ahora dos barreras de potencial genéricas en la figura Fig. 2.9, con diferentes alturas  $U_1$  y  $U_2$  y anchuras  $L_1$  y  $L_2$ , separadas una distancia arbitraria  $D$ .

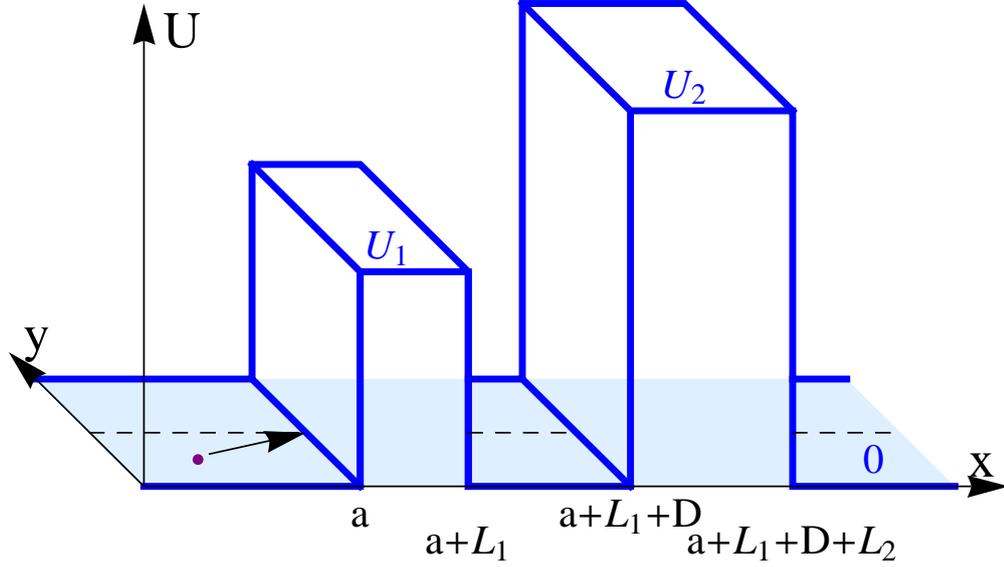


Figura 2.9: Dos barreras de potencial de alturas  $U_1$  y  $U_2$ , y anchuras  $L_1$  y  $L_2$  respectivamente, separadas una distancia  $D$ .

El potencial de dichas barreras es ahora:

$$U(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < a \\ U_1 & \text{si } a < x < a + L_1 \\ 0 & \text{si } a + L_1 < x < a + L_1 + D \\ U_2 & \text{si } a + L_1 + D < x < a + L_1 + D + L_2 \\ 0 & \text{si } a + L_1 + D + L_2 < x \end{cases} \quad (2.21)$$

Podemos construir la solución a nuestro potencial mediante la siguiente función de onda, troceada en las mismas regiones que el potencial:

$$\begin{aligned} \Psi_I(x, y, t) &= \frac{e^{i(k_y y - \frac{E}{\hbar} t)}}{\sqrt{2LW}} \left\{ e^{ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ s \frac{k_+}{k} \end{pmatrix} + r e^{-ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ -s \frac{k_-}{k} \end{pmatrix} \right\} \\ \Psi_{II}(x, y, t) &= \frac{e^{i(k_y y - \frac{E}{\hbar} t)}}{\sqrt{2LW}} \left\{ A_1 e^{q_1 x} \begin{pmatrix} 1 \\ s_1 \frac{q_{1+}}{q_1} \end{pmatrix} + B_1 e^{-iq_1 x} \begin{pmatrix} 1 \\ -s_1 \frac{q_{1-}}{q_1} \end{pmatrix} \right\} \\ \Psi_{III}(x, y, t) &= \frac{e^{i(k_y y - \frac{E}{\hbar} t)}}{\sqrt{2LW}} \left\{ C_1 e^{ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ s \frac{k_+}{k} \end{pmatrix} + D_1 e^{-ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ -s \frac{k_-}{k} \end{pmatrix} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Psi_{IV}(x, y, t) &= \frac{e^{i(k_y y - \frac{E}{\hbar} t)}}{\sqrt{2LW}} \left\{ A_2 e^{q_{2x} x} \begin{pmatrix} 1 \\ s_2 \frac{q_{2+}}{q_2} \end{pmatrix} + B_2 e^{-q_{2x} x} \begin{pmatrix} 1 \\ -s_2 \frac{q_{2-}}{q_2} \end{pmatrix} \right\} \\ \Psi_V(x, y, t) &= \frac{e^{i(k_y y - \frac{E}{\hbar} t)}}{\sqrt{2LW}} t e^{ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ s \frac{k_{\pm}}{k} \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (2.22)$$

donde  $s = \text{sign}(E)$ ,  $s_i = \text{sign}(E - U_i)$ ,  $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$ ,  $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ ,  $q_{i\pm} = q_{i_x} \pm ik_y$  y  $q_i = \sqrt{q_{i_x}^2 + k_y^2}$ .

De manera semejante al caso de una sola barrera de potencial, se ha considerado que las partículas se propagan de izquierda a derecha. En cada zona pueden reflejarse y transmitirse, excepto en la región  $V$ , donde sólo quedan partículas propagándose hacia la derecha, una vez atravesadas todas las barreras de potencial anteriores. Al igual que en el caso anterior, se conservan la energía del electrón  $E$  y el momento perpendicular  $k_y$ . La componente  $x$  del momento, se ajusta en cada región de modo que resulta  $\pm k_x$  en el vacío y  $\pm q_{i_x}$  en cada una de las regiones de las barreras.

Las propiedades de reflexión y transmisión (que vimos en el caso de una barrera), se cumplen también en cada una de las interfaces del sistema ahora considerado. Con la particularidad de que, ahora existen *dos ángulos límite*, asociados cada uno de ellos a una barrera de potencial. Para un ángulo de incidencia superior al ángulo límite en cualquiera de las dos barreras de potencial, el electrón se propaga en el interior de la misma por medio de ondas evanescentes. Pudiendo llegar a suceder en ninguna, en una o en ambas barreras de potencial. Los ángulos límite son:

$$\Phi_{l,i} = \arcsin \left| 1 - \frac{U_i}{E} \right|, \quad i = 1, 2 \quad (2.23)$$

Utilizando la condición de continuidad de la función de onda a través de los límites entre regiones contiguas, se debe cumplir:

$$\Psi_I(a, y, t) = \Psi_{II}(a, y, t), \quad (2.24)$$

$$\Psi_{II}(a + L_1, y, t) = \Psi_{III}(a + L_1, y, t), \quad (2.25)$$

$$\Psi_{III}(a + L_1 + D, y, t) = \Psi_{IV}(a + L_1 + D, y, t), \quad (2.26)$$

$$\Psi_{IV}(a + L_1 + D + L_2, y, t) = \Psi_V(a + L_1 + D + L_2, y, t), \quad (2.27)$$

lo que proporciona

$$\begin{aligned}
 r = s \frac{e^{i2ak_x}}{(Z_1 + iZ_2)} \frac{k_y k_+}{k} & \\
 \left\{ \left( i(kq_2 s s_2 - k_y^2) \sin(L_2 q_{2x}) - k_x q_{2x} \cos(L_2 q_{2x}) \right) (sk - s_1 q_1) \sin(L_1 q_{1x}) \right. & \\
 + e^{i2Dk_x} \left( i(k_y^2 - kq_1 s s_1) \sin(L_1 q_{1x}) - k_x q_{1x} \cos(L_1 q_{1x}) \right) & \\
 \left. (ks - q_2 s_2) \sin(L_2 q_{2x}) \right\}, & \quad (2.28)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 A_1 = s \frac{e^{ia(k_x - q_{1x}) - iL_1 q_{1x}}}{(Z_1 + iZ_2)} \frac{k_x}{2k} & \\
 \left\{ (k_+ s_1 q_1 + skq_{1-}) \left( k_x q_{2x} \cos(L_2 q_{2x}) + i(k_y^2 - s s_2 k q_2) \sin(L_2 q_{2x}) \right) \right. & \\
 + e^{2iDk_x} k_y (s s_1 k q_1 - k_+ q_{1-}) (sk - s_2 q_2) \sin(L_2 q_{2x}) \left. \right\}, & \quad (2.29)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 B_1 = s \frac{e^{ia(k_x + q_{1x}) + iL_1 q_{1x}}}{(Z_1 + iZ_2)} \frac{k_x}{2k} & \\
 \left\{ (skq_{1+} - k_+ s_1 q_1) \left( k_x q_{2x} \cos(L_2 q_{2x}) + i(k_y^2 - s s_2 k q_2) \sin(L_2 q_{2x}) \right) \right. & \\
 + e^{2iDk_x} k_y (k_+ q_{1+} + s s_1 k q_1) (s_2 q_2 - sk) \sin(L_2 q_{2x}) \left. \right\}, & \quad (2.30)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 C_1 = \frac{e^{-iL_1 k_x}}{(Z_1 + iZ_2)} k_x q_{1x} & \\
 \left( k_x q_{2x} \cos(L_2 q_{2x}) + i(k_y^2 - s s_2 k q_2) \sin(L_2 q_{2x}) \right), & \quad (2.31)
 \end{aligned}$$

$$D_1 = s \frac{e^{i(2a+2D+L_1)k_x}}{(Z_1 + iZ_2)} \frac{k_x}{k} q_{1x} k_y k_+ (s_2 q_2 - sk) \sin(L_2 q_{2x}), \quad (2.32)$$

$$A_2 = s \frac{e^{-i(L_1+L_2)q_{2x} + i(a+D)(k_x - q_{2x})}}{(Z_1 + iZ_2)} \frac{k_x^2 q_{1x}}{2k} (s_2 q_2 k_+ + skq_{2-}), \quad (2.33)$$

$$B_2 = s \frac{e^{i(L_1+L_2)q_{2x} + i(a+D)(k_x + q_{2x})}}{(Z_1 + iZ_2)} \frac{k_x^2 q_{1x}}{2k} (q_{2+} sk - k_+ s_2 q_2), \quad (2.34)$$

$$t = e^{-ik_x(L_1+L_2)} \frac{k_x^2 q_{1x} q_{2x}}{Z_1 + iZ_2}, \quad (2.35)$$

$$\begin{aligned}
 Z_1 = k_x^2 q_{1x} q_{2x} \cos(L_1 q_{1x}) \cos(L_2 q_{2x}) & \\
 - \left( s_1 s_2 k^2 q_1 q_2 + k_y^4 - skk_y^2 (s_1 q_1 + s_2 q_2) \right) \sin(L_1 q_{1x}) \sin(L_2 q_{2x}) & \\
 + k_y^2 \left( s_1 s_2 q_1 q_2 - sk(s_1 q_1 + s_2 q_2) + k^2 \right) \cos(2Dk_x) \sin(L_1 q_{1x}) \sin(L_2 q_{2x}) & \\
 & \quad (2.36)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Z_2 = & k_y^2 \left( s_1 s_2 q_1 q_2 - s k (s_1 q_1 + s_2 q_2) + k^2 \right) \sin(2Dk_x) \sin(L_1 q_{1x}) \sin(L_2 q_{2x}) \\
 & - k_x \left( q_{2x} (s s_1 k q_1 - k_y^2) \cos(L_2 q_{2x}) \sin(L_1 q_{1x}) \right. \\
 & \left. + q_{1x} (s s_2 k q_2 - k_y^2) \cos(L_1 q_{1x}) \sin(L_2 q_{2x}) \right) \quad (2.37)
 \end{aligned}$$

Y el coeficiente de transmisión resulta, explícitamente dependiente de las características de la barrera  $U_1, U_2, L_1, L_2$  y  $D$ , así como de las características del electrón incidente  $E$  y  $\phi$ :

$$\begin{aligned}
 T = 1 - R = tt^* = T[E, U_1, U_2, L_1, L_2, D, \phi] = & \\
 = \left\{ \left( \cos \left[ \frac{L_1 \epsilon_1}{\hbar v_F} \right] \cos \left[ \frac{L_2 \epsilon_2}{\hbar v_F} \right] + \left( U_1 U_2 \tan^2 \phi \cos \left[ \frac{2DE \cos \phi}{\hbar v_F} \right] - \right. \right. \right. & \\
 \left. \left. \frac{U_1 - E \cos^2 \phi}{\cos \phi} \frac{U_2 - E \cos^2 \phi}{\cos \phi} \right) \frac{\sin \left[ \frac{L_1 \epsilon_1}{\hbar v_F} \right]}{\epsilon_1} \frac{\sin \left[ \frac{L_2 \epsilon_2}{\hbar v_F} \right]}{\epsilon_2} \right)^2 + & \\
 \left( U_1 U_2 \tan^2 \phi \sin \left[ \frac{2DE \cos \phi}{\hbar v_F} \right] \frac{\sin \left[ \frac{L_1 \epsilon_1}{\hbar v_F} \right]}{\epsilon_1} \frac{\sin \left[ \frac{L_2 \epsilon_2}{\hbar v_F} \right]}{\epsilon_2} + \right. & \\
 \left. + \frac{U_1 - E \cos^2 \phi}{\cos \phi} \cos \left[ \frac{L_2 \epsilon_2}{\hbar v_F} \right] \frac{\sin \left[ \frac{L_1 \epsilon_1}{\hbar v_F} \right]}{\epsilon_1} + \right. & \\
 \left. + \frac{U_2 - E \cos^2 \phi}{\cos \phi} \cos \left[ \frac{L_1 \epsilon_1}{\hbar v_F} \right] \frac{\sin \left[ \frac{L_2 \epsilon_2}{\hbar v_F} \right]}{\epsilon_2} \right)^2 \Big\}^{-1} & \quad (2.38)
 \end{aligned}$$

siendo

$$\epsilon_i = \epsilon_i[E, U_i, \phi] = \sqrt{(E - U_i)^2 - E^2 \sin^2 \phi}, \quad i = 1, 2. \quad (2.39)$$

Casos particulares de las dos barreras de potencial en la ecuación Eq[2.21], que según se demuestra mediante un cálculo directo, se reducen apropiadamente a:

- Cuando  $U_{j \neq i} = 0$  al caso de una sola barrera de potencial de longitud  $L_i$ .
- Cuando  $D = 0$ , y  $U_1 = U_2$  a una sola barrera de potencial de longitud  $L_1 + L_2$ .

El coeficiente de transmisión es invariante frente al intercambio de las variables correspondientes a las dos barreras, y resulta por tanto *independiente*

*del orden* en que se coloquen las dos barreras de potencial. O lo que es lo mismo, el resultado es independiente de que la incidencia tenga lugar desde la izquierda o desde la derecha.

También pone de manifiesto el fenómeno de *acoplamiento* entre ambas barreras de potencial, debido a la aparición no trivial del parámetro  $D$ . Si se considera que las barreras están muy alejadas,  $D \gg L_1, L_2$  entonces las oscilaciones  $\sin(2Dk_x)$  y  $\cos(2Dk_x)$  se hacen muy rápidas y pueden ser sustituidas por su valor medio que es nulo. En estas condiciones desaparece el acoplamiento entre barreras y el coeficiente de transmisión se reduce al producto de los coeficientes de dos barreras independientes  $T = T_1 \cdot T_2$ .

También en este caso se cumple la simetría del coeficiente de transmisión respecto al ángulo de incidencia  $T(\phi) = T(-\phi)$  y es la unidad para un ángulo de incidencia nulo (*paradoja de Klein*). Es decir, las dos barreras de potencial son transparentes para todos los electrones que incidan perpendicularmente a ellas, independientemente de su valor de energía y de la altura de las barreras de potencial. La doble barrera de potencial también es transparente para aquellos electrones con  $q_{1x} = \frac{n_1\pi}{L_1}$  y  $q_{2x} = \frac{n_2\pi}{L_2}$ , es decir cuya energía y ángulo de incidencia cumplen la doble condición de la ecuación Eq[2.40] a la vez. Ya que si no, podría suceder que una barrera fuera transparente y la otra no.

$$\left(\frac{n_i\pi\hbar v_F}{L_i}\right)^2 = (E - U_i)^2 - (E \sin \phi)^2, \quad i = 1, 2 \quad (2.40)$$

De forma semejante al caso de una sola barrera de potencial, consideramos que los electrones inciden con un ángulo inferior al menor de los dos ángulos límite del sistema, asociados a cada barrera de potencial en la ecuación Eq[2.23]. Si lo hacen con un ángulo superior a alguno de ellos, o a ambos, el análisis sigue siendo válido, y el único cambio que se ha de realizar en las fórmulas anteriores es cambiar  $q_{ix}$  por  $iq_{ix}$ , lo que transforma las *ondas planas*  $e^{\pm iq_{ix}x}$  en *ondas evanescentes*  $e^{\mp q_{ix}x}$ . En el interior de una o de las dos barreras de potencial, el transporte de electrones no contiene términos oscilatorios sino exponenciales reales. En cuanto a los coeficientes, se ha de cambiar  $\cos(L_i q_{ix})$  por  $\cosh(L_i q_{ix})$  y  $\sin(L_i q_{ix})$  por  $i \sinh(L_i q_{ix})$ .

En función de la energía del electrón incidente, del ángulo de incidencia y de los valores característicos de las dos barreras de potencial, así como de la separación entre ellas, podemos obtener una expresión explícita del coeficiente de transmisión para la *doble barrera de potencial*:

$$T = \frac{1}{\hat{Z}_1^2 + \hat{Z}_2^2} \quad (2.41)$$

$$\begin{aligned} \hat{Z}_1 = & \cos\left(\frac{L_1\epsilon_1}{\hbar v_F}\right) \cos\left(\frac{L_2\epsilon_2}{\hbar v_F}\right) \\ & - \left(2U_1U_2 \tan^2\phi \sin^2\left(\frac{D\epsilon}{\hbar v_F}\right) + (E - U_1)(E - U_2) - E^2 \sin^2\phi\right) \\ & \cdot \frac{\sin\left(\frac{L_1\epsilon_1}{\hbar v_F}\right) \sin\left(\frac{L_2\epsilon_2}{\hbar v_F}\right)}{\epsilon_1 \epsilon_2} \end{aligned} \quad (2.42)$$

$$\begin{aligned} \hat{Z}_2 = & U_1U_2 \tan^2\phi \sin\left(\frac{2D\epsilon}{\hbar v_F}\right) \frac{\sin\left(\frac{L_1\epsilon_1}{\hbar v_F}\right) \sin\left(\frac{L_2\epsilon_2}{\hbar v_F}\right)}{\epsilon_1 \epsilon_2} \\ & + \frac{U_1 - E \cos^2\phi}{\cos\phi} \cos\left(\frac{L_2\epsilon_2}{\hbar v_F}\right) \frac{\sin\left(\frac{L_1\epsilon_1}{\hbar v_F}\right)}{\epsilon_1} \\ & + \frac{U_2 - E \cos^2\phi}{\cos\phi} \cos\left(\frac{L_1\epsilon_1}{\hbar v_F}\right) \frac{\sin\left(\frac{L_2\epsilon_2}{\hbar v_F}\right)}{\epsilon_2} \end{aligned} \quad (2.43)$$

siendo

$$\epsilon = E \cos\phi, \quad \epsilon_i = \sqrt{(E - U_i)^2 - E^2 \sin^2\phi} \quad i = 1, 2 \quad (2.44)$$

En la figura Fig. 2.10 se representa el coeficiente de transmisión frente al ángulo de incidencia para dos barreras de potencial de alturas  $U_1 = 0.2$  eV y  $U_2 = 0.4$  eV, anchuras  $L_1 = 50$  nm y  $L_2 = 60$  nm, separadas una distancia  $D = 0, 20, 40, 60$  nm, siendo la energía incidente 0.1 eV en (a) y 0.3 eV en (b). Los parámetros utilizados son los típicamente considerados en las referencias [59, 67, 74]. En dicha figura Fig. 2.10 se aprecia que, para una energía fija, la envolvente del coeficiente de transmisión tiende a decrecer más o menos abruptamente a medida que aumenta el ángulo de incidencia. La existencia del ángulo límite en la ecuación Eq[2.23] que dependía de la energía y de la altura de la barrera de potencial es evidente al comparar ambas figuras.

En la figura Fig. 2.11 se representa el coeficiente de transmisión frente a la energía de la partícula incidente para dos barreras de potencial de parámetros  $U_1 = 0.2$  eV,  $U_2 = 0.4$  eV,  $L_1 = 50$  nm,  $L_2 = 60$  nm, y distancias de separación  $D = 0, 20, 40$  y 60 nm, siendo el ángulo de incidencia  $\phi = \pi/36$  en (a),  $\pi/12$  en (b) y  $\pi/6$  en (c). En (b) se aprecia que,

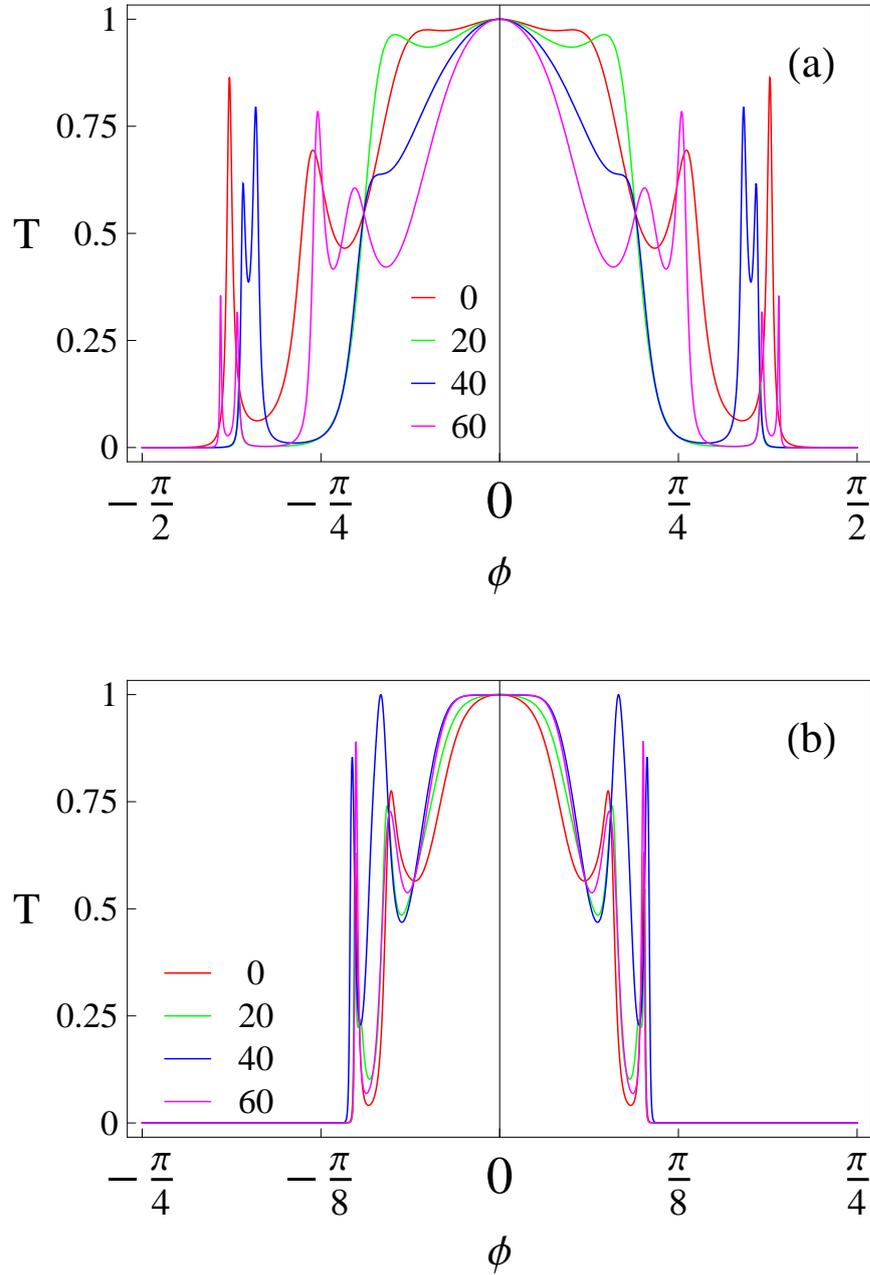


Figura 2.10: Coeficiente de transmisión frente al ángulo de incidencia para dos barreras de potencial de parámetros  $U_1 = 0.2$  eV,  $U_2 = 0.4$  eV,  $L_1 = 50$  nm,  $L_2 = 60$  nm, para diversos valores de  $D$  (nm), siendo la energía incidente 0.1 eV en (a) (0.3 eV en (b)). En (b) la envolvente del coeficiente de transmisión cae abruptamente asociado a la existencia de un ángulo límite.

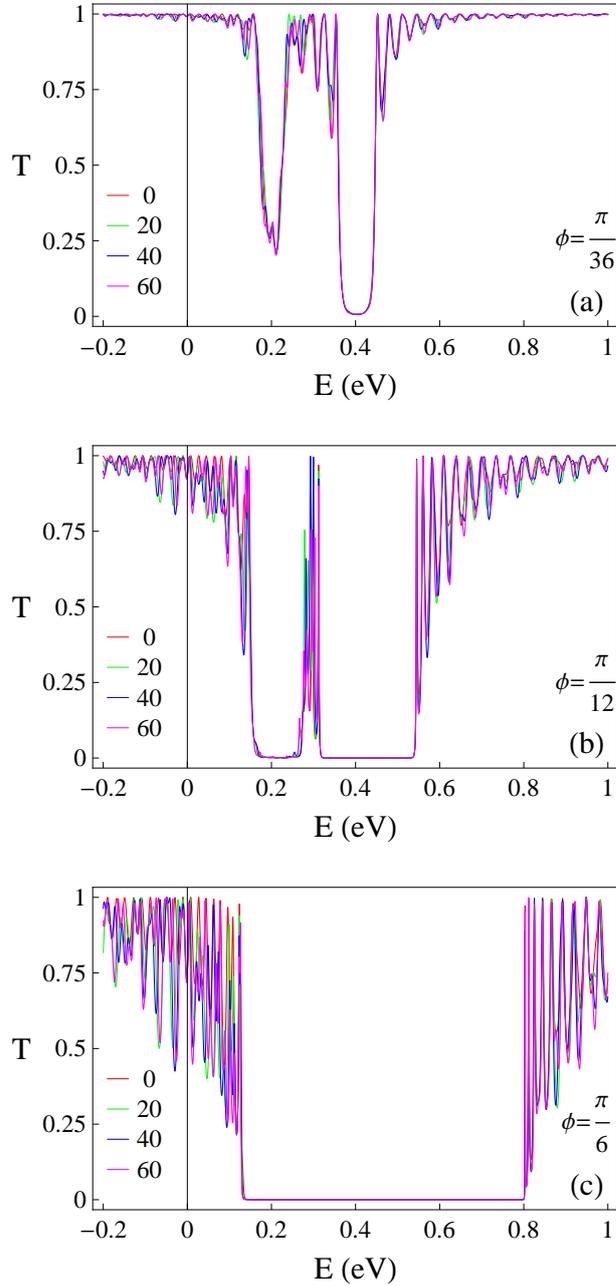


Figura 2.11: Coeficiente de transmisión frente a la energía de la partícula incidente para dos barreras de potencial de parámetros  $U_1 = 0.2$  eV,  $U_2 = 0.4$  eV,  $L_1 = 50$  nm,  $L_2 = 60$  nm, para diversos valores de  $D$  (nm). El ángulo de incidencia  $\phi = \pi/36$  en (a),  $\pi/12$  en (b),  $\phi = \pi/6$  en (c). Para ángulos de incidencia  $\phi$  suficientemente grandes aparecen dos pseudogaps, que al aumentar  $\phi$  pueden llegar a colapsar en un único pseudogap.

para un ángulo de incidencia fijo, el coeficiente de transmisión cae prácticamente a cero en el intervalo energético  $[(1 + \sin \phi)^{-1}U_1, (1 - \sin \phi)^{-1}U_1]$ , a continuación se recupera, volviendo a tomar valores próximos a la unidad, y vuelve a caer de nuevo a un valor casi nulo para el intervalo energético  $[(1 + \sin \phi)^{-1}U_2, (1 - \sin \phi)^{-1}U_2]$ . En estos intervalos, el ángulo de incidencia es superior al ángulo límite y la transmisión de electrones se hace por medio de ondas evanescentes en las zonas asociadas a las barreras de potencial donde suceda esto. Sin embargo, en (a) el ángulo de incidencia no es suficientemente grande, como para que el coeficiente de transmisión caiga a cero en el primer mínimo, aunque sí en el segundo. Tanto en (a) como en (b), para  $\phi > 0$ , si  $(1 - \sin \phi)^{-1}U_1 < (1 + \sin \phi)^{-1}U_2$  se pueden distinguir en el espectro de energías dos regiones claramente diferenciadas en las cuales el coeficiente de transmisión es mínimo. Si  $(1 - \sin \phi)^{-1}U_1 > (1 + \sin \phi)^{-1}U_2$  ambas regiones donde el coeficiente de transmisión es mínimo se solapan y sólo puede distinguirse una única zona de valor mínimo. Esto es lo que sucede en (c). En este caso, a medida que aumenta el ángulo de incidencia  $\phi$ , aumentará la anchura del pseudogap. En los dos últimos casos subrayamos la existencia de *pseudogaps efectivos de energía*, dentro de los cuales, la probabilidad de transmisión del electrón cae prácticamente a cero.

En los experimentos la energía potencial de las barreras  $U_1$  y  $U_2$  son sintonizables por medio de los potenciales externos aplicados a las puertas superiores  $V_1$  y  $V_2$ . Puesto que su ajuste resulta sencillo, interesa ver los cambios que se producen en la transmisión para distintos valores de dichos potenciales. En la figura Fig. 2.12 represento algunas líneas de nivel del coeficiente de transmisión como función de los potenciales  $U_1$  y  $U_2$ , para diferentes valores de energía  $E$  y ángulo de incidencia  $\phi$ . La figura Fig. 2.12 nos da las líneas de nivel para  $T = 0.1$  (amarillo),  $0.3$  (naranja),  $0.5$  (rojo),  $0.7$  (verde) y  $0.9$  (azul), siendo  $L_1 = 50$  nm,  $L_2 = 60$  nm,  $D = 20$ nm,  $\phi = \pi/12$ , para  $E = 0.05$  (panel superior izq.) y  $0.1$  eV (panel superior dcho.). El panel inferior izq. y dcho. nos da las líneas de nivel con los mismos parámetros que las figuras anteriores, excepto  $\phi = \pi/6$ , para  $E = 0.3$  y  $0.6$  eV respectivamente. Al comparar estas cuatro figuras dos a dos, vemos que a un ángulo fijo cuando duplicamos la energía del portador incidente, aparece una especie de *pasillo de pseudogap*, centrado en  $U_1 = U_2 = E$ , cuya anchura coincide con el valor de  $E$  que estemos utilizando. Es claramente visible en las figuras del panel superior, sin embargo en las figuras del panel inferior se aprecia menos, ya que en la figura del panel inferior derecho el pasillo es tan ancho que no aparece reflejado en su totalidad en la gráfica.

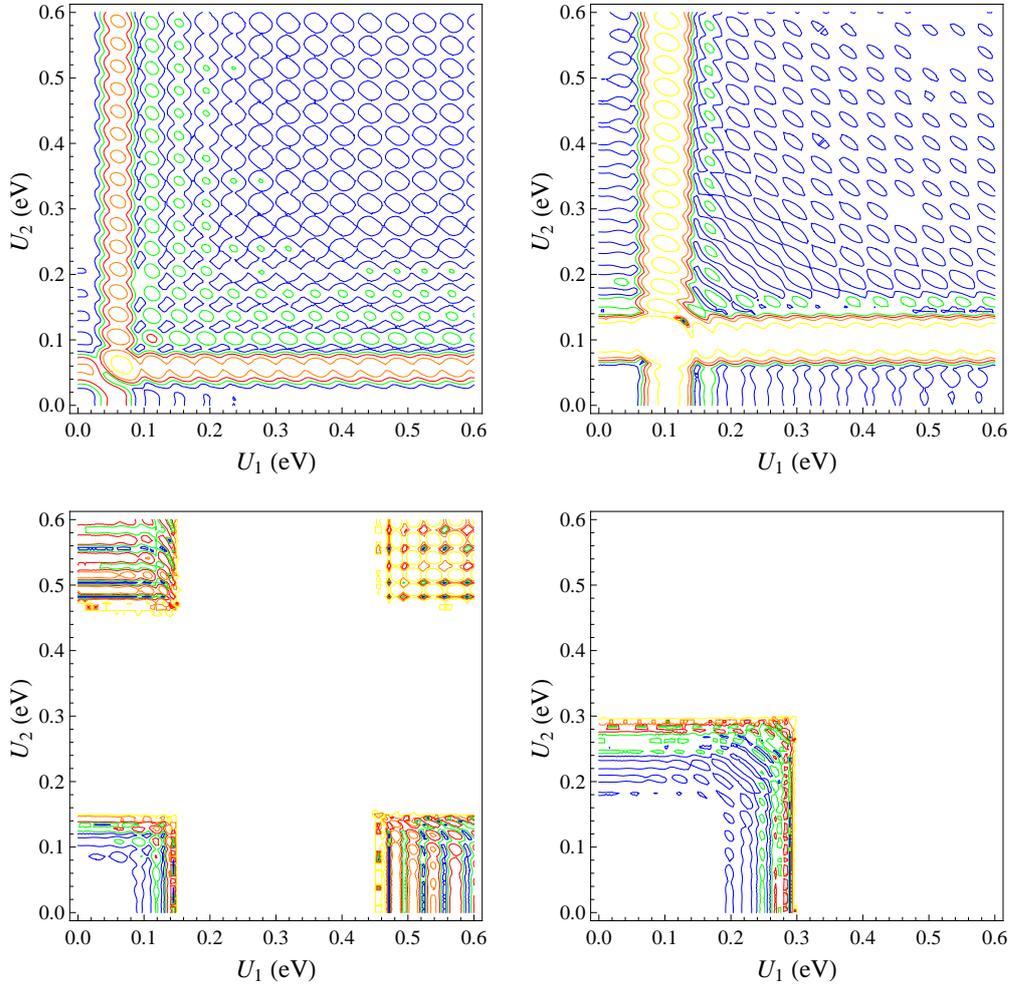


Figura 2.12: Líneas de nivel para para  $T = 0.1$  (amarillo),  $0.3$  (naranja),  $0.5$  (rojo),  $0.7$  (verde) y  $0.9$  (azul), siendo  $L_1 = 50$  nm,  $L_2 = 60$  nm,  $D = 20$  nm. Parámetros :  $E$  y  $\phi = 0.05$  eV y  $\pi/12$  (panel superior izq.),  $0.1$  eV y  $\pi/12$  (panel superior dcho.),  $0.3$  eV y  $\pi/6$  (panel inferior izq.) y  $0.6$  eV y  $\pi/6$  (panel inferior dcho.). Aparece un pasillo de pseudogap centrado en  $U_1 = U_2 = E$ , cuya anchura coincide con la energía que estamos utilizando. Las figuras de la derecha tienen una energía doble a las de la izquierda, por lo que la anchura del pasillo en tales casos se duplica.

## 2.4. Resonancias para una doble barrera de potencial

Para *dos barreras simétricas* solamente existe un intervalo energético para el pseudogap, que coincide en valor con el que habíamos obtenido para una única barrera de potencial. Esto es debido a que únicamente dependía de la altura de la barrera de potencial y del ángulo de incidencia, que coinciden en ambos casos:

$$[(1 + \sin |\phi|)^{-1}U_0, (1 - \sin |\phi|)^{-1}U_0] \quad (2.45)$$

La aplicación de la transmisión perfecta  $T = 1$  a la ecuación Eq[2.41] permite obtener una expresión cerrada de las energías que se transmiten íntegramente a través de las dos barreras simétricas. Obtenemos transmisión sin reflexión para el caso de barreras idénticas cuando se verifica:

$$4 \tan^2 \phi \frac{\sin^2[\frac{LU_0}{\hbar v_F} F(E, \phi)]}{F(E, \phi)^2} \left( \frac{\frac{E}{U_0} \cos^2 \phi - 1}{\cos \phi} \frac{\sin[\frac{LU_0}{\hbar v_F} F(E, \phi)]}{F(E, \phi)} \sin[\frac{DE}{\hbar v_F} \cos \phi] - \cos[\frac{DE}{\hbar v_F} \cos \phi] \cos[\frac{LU_0}{\hbar v_F} F(E, \phi)] \right)^2 = 0 \quad (2.46)$$

siendo

$$F(E, \phi) = \sqrt{\left(1 - \frac{E}{U_0}\right)^2 - \frac{E^2}{U_0^2} \sin^2 \phi} \quad (2.47)$$

que contiene el caso asociado al *túnel de Klein*. En el caso de una única barrera las resonancias se encuentran fuera del pseudogap. Sin embargo en el caso de dos barreras simétricas (y también para barreras desiguales), aparecen *además*, superpuestas, *resonancias sumamente estrechas* (tipo delta) y equiespaciadas en el pseudogap, como se aprecia en la figura Fig. 2.13, donde se representa el coeficiente de transmisión para una barrera de potencial en rojo ( $U_0 = 0.2$  eV,  $L = 100$  nm y  $\phi = \pi/30$ ), y para dos barreras de potencial con los mismos parámetros ( $U_1 = U_2 = 0.2$  eV,  $L_1 = L_2 = D = 100$  nm y  $\phi = \pi/30$ ) en azul. Imponiendo que el coeficiente de transmisión sea unitario para dos barreras idénticas, obtendremos la expresión Eq[2.48], a partir de la cual obtendremos las resonancias:

$$\frac{\frac{E}{U_0} \cos^2 \phi - 1}{\cos \phi} \tan \left[ \frac{DE}{\hbar v_F} \cos \phi \right] = \frac{\sqrt{\frac{E^2}{U_0^2} \sin^2 \phi - \left(\frac{E}{U_0} - 1\right)^2}}{\tanh \left[ \frac{LU_0}{\hbar v_F} \sqrt{\frac{E^2}{U_0^2} \sin^2 \phi - \left(\frac{E}{U_0} - 1\right)^2} \right]} \quad (2.48)$$

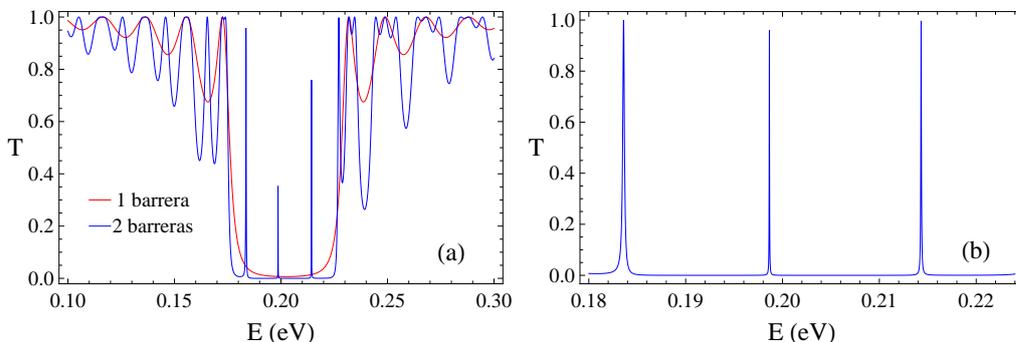


Figura 2.13: En (a)  $T$  frente a la energía para una y dos barreras de potencial simétricas con  $U_0 = 0.2$  eV,  $L = D = 100$  nm y  $\phi = \pi/30$ . En (b), ampliación de la zona central de (a). Para dos barreras de potencial simétricas aparecen resonancias tipo delta equiespaciadas en la zona donde teníamos un pseudogap en el caso de una única barrera de potencial.

Dichas resonancias, en nuestro ejemplo de la figura Fig. 2.13 (b) corresponden a los valores de energía  $E = 0.1836, 0.1987$  y  $0.2143$  eV.

Un aumento en el ángulo de incidencia  $\phi$  provoca un aumento en el intervalo energético asociado al pseudogap en la expresión Eq[2.45]. Observamos que el aumento de  $L$  (asociado a la anchura de las barreras de potencial), pero sobretodo de  $D$  (asociado a la distancia de separación entre las barreras simétricas), provoca un aumento significativo en el número de picos de resonancia dentro del pseudogap. Ello es debido a que la parte izquierda de la expresión Eq[2.48] depende de  $D$  implícitamente a través de una función tangente, mientras que la parte derecha de la expresión Eq[2.48] depende de  $L$  implícitamente a través de una función tangente hiperbólica que se encuentra en el denominador.

Si nuestra doble barrera de potencial deja de ser simétrica, entonces la ecuación Eq[2.48] deja de ser aplicable para detectar picos en el pseudogap. A medida que se modifica la anchura, pero sobre todo la altura, de una de las barreras de potencial con respecto al caso de la doble barrera simétrica de potencial, los picos que aparecían en el pseudogap disminuirán en amplitud y se irán degradando progresivamente.

Como conclusión, diremos que es interesante resaltar el hecho de que sobre el pseudogap puedan superponerse resonancias sumamente estrechas (tipo delta) a las energías definidas por la ecuación Eq[2.48]. Creemos que

estas resonancias en energía, dentro de una zona donde básicamente no existe transmisión, pudieran ser utilizadas para la sintonización puntual a ciertos valores energéticos de la transmisión, con una tecnología en la cual se pudiera controlar la dirección de transmisión del haz electrónico. Es decir, el dispositivo resultante se comportaría como *filtro pasa-banda muy estrecho* o filtro sintonizado.

## 2.5. Resumen y conclusiones

A lo largo de este capítulo hemos analizado los estados en una lámina de grafeno sometida a una o dos barreras de potencial. Para ello hay que tener en cuenta básicamente dos consideraciones: la energía es una constante del movimiento, y también que al considerar un potencial unidimensional  $U = U(x)$ , la componente  $k_y$  del vector de ondas mantendrá su valor en todas las zonas. Además, la relación entre el ángulo incidente  $\phi$  y el ángulo transmitido  $\theta$  en una barrera de potencial, depende de la relación entre la energía del portador incidente y la altura de la barrera de potencial  $E/U_0$ , de tal forma que si es inferior a 0.5, el ángulo transmitido se acerca a la normal; si es superior a 0.5 se aleja de la normal, en este contexto aparece el concepto de *ángulo límite*, que más adelante será clave; y si coincide con 0.5 el ángulo transmitido y el incidente coinciden.

Obtenemos una **expresión analítica exacta** para el coeficiente de transmisión de una lámina de grafeno sujeta a una barrera de potencial eléctrico. Debido a que el coeficiente de transmisión es unitario para incidencia perpendicular (paradoja de Klein) o bien para aquellos parámetros que verifiquen la condición de la fórmula Eq[2.17], no puede existir confinamiento de los portadores de carga mediante barreras de potencial eléctrico en el grafeno prístino con las características que hemos adoptado. La aparición del ángulo límite se observa claramente en la figura Fig. 2.5, ya que el coeficiente de transmisión decae abruptamente. Más interesante aún, es el hecho de que al representar el coeficiente de transmisión frente a la energía para valores dados de  $L \cdot U_0$  y  $\phi$ , observamos simetría en torno al eje  $E = U_0 \cos^{-2} \phi$ , donde toma su valor mínimo  $T = \cosh^{-2}[LU_0/(\hbar v_F)]$ . Además para ángulos de incidencia suficientemente elevados en el intervalo energético  $(1 + \sin |\phi|)^{-1}U_0 \leq E \leq (1 - \sin |\phi|)^{-1}U_0$ , el coeficiente de transmisión es prácticamente nulo apareciendo así un *pseudogap de energía* de valor  $2U_0 \sin |\phi| \cos^{-2} \phi$  en torno al eje de simetría.

También hemos obtenido una expresión analítica exacta en el caso de

dos barreras de potencial. Observamos que el coeficiente de transmisión es independiente del orden en que se coloquen éstas. Aparece el fenómeno de acoplamiento entre ellas, siempre que la distancia de separación  $D$  no sea  $D \gg L_1, L_2$ . También para dos barreras de potencial, al analizar el coeficiente de transmisión - dependiendo del ángulo de incidencia - puede aparecer un pseudogap de energía asociado a cada barrera de potencial, que colapse en un único pseudogap en energía si se verifica  $(1 - \sin \phi)^{-1}U_1 > (1 + \sin \phi)^{-1}U_2$ .

Por último, hemos considerado el caso de una doble barrera simétrica de potencial. Al analizar el coeficiente de transmisión observamos que tiene lugar la aparición de resonancias muy estrechas (tipo delta) dentro del pseudogap en energía, lo cual es sumamente interesante. Los valores energéticos a los cuales aparecen dichas resonancias vienen dados por la ecuación Eq[2.48]. El número de dichas resonancias extremadamente estrechas aumentará considerablemente con el aumento de la distancia de separación  $D$  entre barreras de potencial. Creemos que estas resonancias en energía, dentro de una zona donde básicamente no existe transmisión, pudieran llegar a ser utilizadas para la *sintonización* a ciertos valores discretos de energía en la transmisión, siempre que contásemos con una tecnología en la cual se pudiera controlar la dirección de transmisión del haz electrónico. Es decir, el dispositivo resultante se comportaría como *filtro sintonizado*. Subrayar que la mayor parte de los resultados de este capítulo aparecen en nuestro artículo [71].



# Capítulo 3

## Influencia del ángulo de incidencia en la conductancia

### 3.1. Introducción

Una vez calculado el coeficiente de transmisión para una lámina de grafeno a través de una y dos barreras de potencial, vamos ahora a determinar la conductancia con objeto de comparar nuestros resultados con los experimentos. Así, conseguiremos enlazar el cálculo teórico con una magnitud física experimental fácilmente medible. A partir de la densidad de corriente determinaremos una expresión general analítica con que caracterizar la *conductancia efectiva*, es decir la conductancia por unidad de anchura, del dispositivo. Construimos en este capítulo un modelo de funcionamiento para un transistor de efecto de campo de grafeno (GFET) y analizamos su conductancia por aplicación de la fórmula anterior, haciendo uso del coeficiente de transmisión determinado en el capítulo previo. Un aspecto relevante en el funcionamiento del GFET es el carácter direccional o no del ataque de los portadores sobre la barrera. ¿Tienen todos los electrones la misma dirección de impacto o se distribuyen en diferentes direcciones con ángulos de incidencia diferentes? Analizamos este fenómeno asignando pesos estadísticos diferentes a las distintas direcciones de incidencia y encontramos en la conductancia del GFET una casuística variada que discutimos gráficamente.

### 3.2. Conductancia efectiva

El propósito de este apartado es aplicar los resultados obtenidos en el capítulo anterior que determinaban analíticamente el coeficiente de transmisión a través de una barrera de potencial, en la descripción del funcio-

namiento de algunos dispositivos electrónicos, principalmente de un GFET, que debe definirse mediante su *ecuación característica corriente-voltaje* o, equivalentemente, mediante su *conductancia*. Para ello, debemos estudiar el *transporte de portadores* a través del dispositivo cuantificando la corriente eléctrica transportada por cada uno de los electrones que atraviesa el dispositivo ocupando alguno de los estados electrónicos de alguno de los canales de conducción disponibles. Utilizaremos para ello el formalismo de Landauer-Büttiker [75, 76] que conecta el coeficiente de transmisión con la densidad de corriente y la conductancia.

Consideramos un GFET cuyo canal activo de conducción es una lámina de grafeno de dimensiones nanoscópicas, sometido a diferentes *puertas de potencial* que pueden establecer una barrera de potencial como la estudiada en [71] y seleccionar una cierta densidad de portadores. Dicho GFET se polariza por medio de una tensión externa drenador-fuente  $V_{DS}$  que proporciona una corriente convencional en el sentido del drenador al surtidor, correspondiendo a un transporte de electrones en sentido contrario.

De acuerdo con Landauer, el papel de los contactos (S) y (D) es el de sendos *reservorios* que proporcionan un colectivo de electrones, con diferentes valores de energía y momento, en equilibrio termodinámico a un potencial químico  $\mu_L$  en la fuente y  $\mu_R$  en el drenador [69], cuya diferencia se establece precisamente mediante el potencial de polarización  $\mu_L - \mu_R = eV_{DS}$ . Estos electrones compiten por llenar los estados cuánticos disponibles en la lámina de grafeno y generan sendas corrientes eléctricas cuya diferencia es la corriente total.

La existencia de una polarización no nula en el dispositivo rompe el equilibrio establecido por los reservorios, sin embargo, se puede demostrar [69, 77], que cuando tanto la polarización como la temperatura son suficientemente bajas, se pueden ignorar estos efectos y tratar el colectivo de electrones como un conjunto en equilibrio a un potencial químico intermedio. En estas condiciones, cada electrón de energía  $E$  y momento  $\mathbf{k} = (k_x, k_y) = (k, \phi)$ , procedente de uno de los reservorios (por ejemplo del surtidor) que entra en el estado  $\Psi$  de uno de los canales de conducción de la lámina de grafeno de longitud  $L$  y anchura  $W$ , transporta una corriente eléctrica proporcional al flujo de probabilidad dado por

$$j_x^o = -ev_F\Psi^+\sigma_x\Psi \quad (3.1)$$

de modo que a la salida del dispositivo, la corriente del surtidor resulta proporcional a su coeficiente de transmisión. En efecto,

$$j_x^o = -ev_F\Psi^+\sigma_x\Psi = -se\frac{v_F}{LW}T(E,\phi)\frac{k_x}{|\mathbf{k}|} = -se\frac{v_F}{LW}T(E,\phi)\cos\phi \quad (3.2)$$

donde  $s = \text{sign}(E)$ , y  $j_x^o$  tiene dimensiones de intensidad de corriente por unidad de longitud.

La corriente total del emisor es debida a todos los electrones con todos los posibles valores de  $k_x$  y  $k_y$ , que se introducen en el sistema y se propagan a través de los orbitales disponibles. Su número, con momentos comprendidos entre  $(k_x, k_y)$  y  $(k_x + dk_x, k_y + dk_y)$ , depende del número de estados disponibles y de su grado de ocupación. Se conoce que cada momento permitido ocupa una superficie en el espacio de momentos de un grafeno bidimensional de  $\frac{2\pi}{L} \times \frac{2\pi}{W}$ , y por ello su número en un rectángulo  $dk_x dk_y$  es  $2 \times 2 \times dk_x dk_y / (\frac{2\pi}{L} \times \frac{2\pi}{W}) = (LW/\pi^2) dk_x dk_y$  si se considera la duplicidad de spin y la de valle [78].

En un sistema en equilibrio, la distribución de estos electrones está dada mediante la función de Fermi  $f_o(E, \mu)$  [79]

$$f_o(E, \mu) = \left(1 + e^{\frac{E-\mu}{k_B T}}\right)^{-1} \quad (3.3)$$

de modo que el número de electrones en este intervalo, en equilibrio a un potencial de Fermi  $\mu_L$  procedentes del surtidor con un factor de ocupación  $f_o(E, \mu_L)$ , es

$$dn_{elec} = 2 \times 2 \times LW \frac{dk_x dk_y}{4\pi^2} f_o(E, \mu_L) = \frac{LW}{\pi^2} f_o(E, \mu_L) dk_x dk_y \quad (3.4)$$

y cambiando al sistema de coordenadas polares  $dk_x dk_y = |\mathbf{k}| d|\mathbf{k}| d\phi$ , e introduciendo la relación de dispersión  $E = s\hbar v_F |\mathbf{k}|$ , tendremos

$$dn_{elec} = s4LW \frac{EdE d\phi}{h^2 v_F^2} f_o(E, \mu_L) \quad (3.5)$$

La densidad de corriente a que dan lugar estos electrones es entonces

$$dj_x = -\frac{4e}{h^2 v_F} f_o(E, \mu) T(E, \phi) EdE \cos\phi d\phi \quad (3.6)$$

así, la densidad de corriente total procedente del surtidor debida a *todos* los electrones con todas las posibles energías y ángulos de incidencia es

$$j_x = \frac{I}{W} = -\frac{4e}{h^2 v_F} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos\phi d\phi \int_{-\infty}^{\infty} T(E, \phi) f_o(E, \mu_L) EdE \quad (3.7)$$

Un cálculo análogo permite calcular la corriente procedente del drenador. Los portadores procedentes del drenador y surtidor compiten entre sí para transportar corriente a través del canal. Por ello, la corriente neta que fluye a través del canal es

$$j_x = -\frac{4e}{h^2 v_F} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos \phi d\phi \int_{-\infty}^{\infty} \left( T_L(E, \phi) f_o(E, \mu_L) - T_R(E, \phi) f_o(E, \mu_R) \right) E dE \quad (3.8)$$

De acuerdo con las propiedades de simetría de los coeficiente de transmisión  $T_L(E, \phi)$  y  $T_R(E, \phi)$  son idénticos, y por tanto obtenemos la *expresión general* para la densidad de corriente que circula por el dispositivo:

$$j_x = -\frac{4e}{h^2 v_F} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos \phi d\phi \int_{-\infty}^{\infty} T(E, \phi) \left( f_o(E, \mu_L) - f_o(E, \mu_R) \right) E dE \quad (3.9)$$

En algunos casos y bajo ciertas condiciones, la expresión general anterior Eq[3.9] puede ser simplificada:

- Si la polarización existente a bajas temperaturas es muy grande, entonces la contribución debida al reservorio drenador es despreciable ya que su potencial químico es despreciable frente al de la fuente. En dicho caso aproximaremos la corriente total a aquella debida únicamente al reservorio fuente

$$j_x = -\frac{4e}{h^2 v_F} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos \phi d\phi \int_{-\infty}^{\infty} T(E, \phi) f_o(E, \mu_L) E dE. \quad (3.10)$$

- A baja temperatura ( $k_B T < E_F - \mu$ ), cuando el colectivo de electrones está altamente degenerado, la función de Fermi puede aproximarse por la función escalón  $f_o(E, \mu_L) - f_o(E, \mu_R) \approx \theta(E, \mu_R) - \theta(E, \mu_L)$ , dando

$$j_x = -\frac{4e}{h^2 v_F} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos \phi d\phi \int_{\mu_R}^{\mu_L} T(E, \phi) E dE. \quad (3.11)$$

- Si la polarización es muy pequeña, podemos aproximar la distribución de Fermi por su aproximación de Taylor en torno al valor medio de los potenciales químicos  $\mu = \frac{\mu_L + \mu_R}{2}$ , y considerar que los potenciales químicos se establecen por medio de la polarización  $\mu_L - \mu_R = e(V_R - V_L) = e V_{DS}$ , es decir

$$f_o(E, \mu_L) - f_o(E, \mu_R) \approx e \frac{\partial f_o}{\partial \mu} V_{DS} = -e \frac{\partial f_o}{\partial E} V_{DS} \quad (3.12)$$

y por tanto,

$$j_x = -\frac{4e^2}{h^2 v_F} V_{DS} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos \phi d\phi \int_{-\infty}^{\infty} T(E, \phi) \left( -\frac{\partial f_o(E, \mu)}{\partial E} \right) E dE \quad (3.13)$$

- A temperaturas ultrabajas (a cero kelvin donde  $\mu = E_F$ ) y polarización muy baja, podemos aproximar

$$-\frac{\partial f_o(E, \mu)}{\partial E} \approx \delta(E - \mu) = \delta(E - E_F) \quad (3.14)$$

así a partir de las expresiones anteriores Eq[3.13] y Eq[3.14] nos quedará, teniendo en cuenta la simetría del coeficiente de transmisión  $T(E, \phi) = T(E, -\phi)$ ,

$$\begin{aligned} j_x &= -\frac{4e^2}{h^2 v_F} V_{DS} E_F \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} T(E_F, \phi) \cos \phi d\phi \\ &= -\frac{8e^2}{h^2 v_F} V_{DS} E_F \int_0^{\frac{\pi}{2}} T(E_F, \phi) \cos \phi d\phi \end{aligned} \quad (3.15)$$

En todas las fórmulas anteriores, el signo menos describe la dirección correcta de la corriente eléctrica transportada por electrones y huecos, en el sentido del potencial eléctrico decreciente.

En ciertas medidas experimentales, el interés se enfoca no tanto en la densidad de corriente  $j_x$ , como en la conductancia de la muestra  $G$ . A partir de la ley de Ohm y la intensidad de corriente tenemos

$$V_{DS} G = I = \int_0^W j_x dy = j_x W \quad (3.16)$$

y podemos definir la *conductancia efectiva* o conductancia por unidad de longitud (anchura)  $G_{eff}$

$$G_{eff} = \frac{G}{W} = \frac{j_x}{V_{DS}} \quad (3.17)$$

Aplicando la ecuación anterior Eq[3.17] a nuestra expresión general Eq[3.9] obtenemos

$$G_{eff} = \left| \frac{4e}{h^2 v_F V_{DS}} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos \phi d\phi \int_{-\infty}^{\infty} T(E, \phi) \left( f_o(E, \mu_L) - f_o(E, \mu_R) \right) E dE \right| \quad (3.18)$$

En particular, para las condiciones experimentales expresadas en Eq[3.15] tenemos

$$G_{eff} \approx \frac{4e^2}{h^2 v_F} |E_F| \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} T(E_F, \phi) \cos \phi d\phi \quad (3.19)$$

La *conductancia efectiva del dispositivo* depende del potencial aplicado a la puerta superior (top gate) por medio del *coeficiente de transmisión*, y del potencial aplicado a la puerta inferior (back gate), asociado a la *energía de Fermi*  $E_F$ , pero no del potencial de polarización. Ello es debido a que la cuestión es que *no importa la forma del potencial (de polarización)* porque éste finalmente afecta al transporte a través del factor de ocupación [77].

Diferentes dispositivos con diferentes perfiles de potencial darán lugar a diferentes coeficientes de transmisión, que deberán ser determinados en cada caso, pero la fórmula Eq[3.19] seguirá siendo válida mientras las condiciones experimentales bajo las cuales se obtuvo se mantengan. En lo sucesivo consideraremos las condiciones de trabajo que permiten utilizar la conductancia efectiva Eq[3.19], esencialmente  $T \approx 0$  K y  $V_{DS} \approx 0$ .

### 3.3. Modelo para el GFET

La figura Fig. 3.1 muestra el esquema del dispositivo considerado: una lámina de grafeno rectangular (azul) encapsulada entre capas de h-BN [80], con contactos metálicos de Au/Cr (naranja) aunque en el dibujo únicamente hemos puesto Au por cuestión de espacio, que constituyen la fuente (source), el drenador (drain) y la puerta superior (top gate), y una puerta inferior (back gate) constituida por silicio dopado (amarillo), que se colocan bajo una capa de dieléctrico ( $\text{SiO}_2$  [81]).

Las funciones que realizan las puertas inferior y superior en el esquema de la figura son diferentes. La puerta inferior en la figura Fig. 3.1 controla la densidad de portadores de carga y con ella la energía de Fermi de los electrones de transporte en el grafeno, y la puerta superior junto con la inferior modulan la corriente que fluye a través del dispositivo desde fuente a drenador, pasando a través del grafeno donde hemos aplicado potencial mediante la diferencia de tensión entre la puerta superior y la inferior  $V_{TG} - V_{BG}$ . Supondremos que la lámina de grafeno es suficientemente ancha para no ser considerada como una cinta, es decir la anchura debe ser mayor que la longitud de scattering  $W > L_{scatt}$ , la cual típicamente es del orden de  $1 \mu\text{m}$ , y por tanto no existirán efectos de borde. Además a temperatura próxima a 0 K, la densidad de portadores de carga  $n$  tiene una dependencia lineal con el voltaje aplicado a la puerta inferior ( $n \propto V_{BG}$ ) [82] - como detallaremos

a continuación -, y una dependencia cuadrática con la energía de Fermi [7] ( $n \propto E_F^2$ ) como queda reflejado en el Apéndice A.

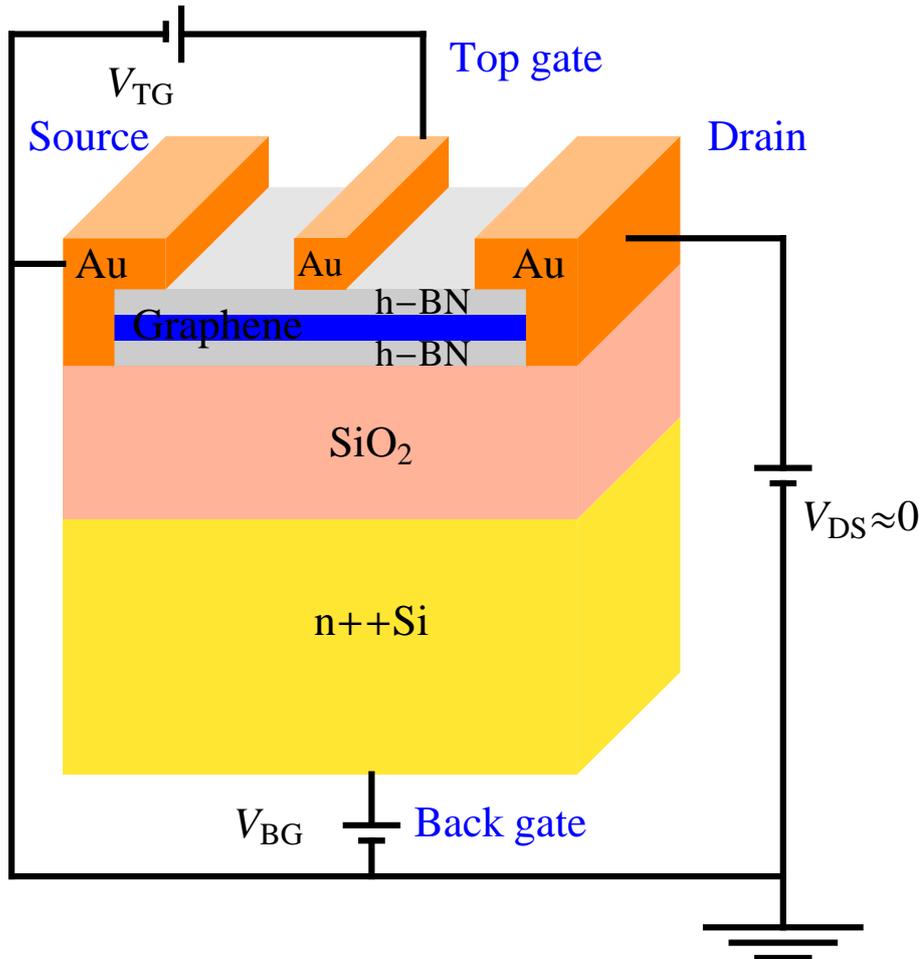


Figura 3.1: Esquema del GFET. La lámina de grafeno representada en azul, las láminas de h-BN en gris, los contactos metálicos en naranja, el dieléctrico en rosa y el silicio dopado en amarillo.

La energía de Fermi del grafeno puede modificarse aplicando voltaje a la back gate. Idealmente el *pico de Dirac*  $V_D$ , también denominado *punto de neutralidad de carga* debería suceder para un voltaje nulo aplicado a la back gate. Sin embargo, experimentalmente no es así, lo cual es debido a la aparición de dopado, dando lugar a una discrepancia respecto al caso ideal en la posición del pico de Dirac, que puede llegar a ser del orden de decenas

de voltios.

Nuestro dispositivo se comporta como un condensador de placas plano-paralelas, constituyendo las partes metálicas, el grafeno y el silicio dopado, separadas una distancia  $d$  (típicamente de 300 nm), por medio de un dieléctrico (con constante dieléctrica  $\epsilon$ ) que en nuestro caso es  $\text{SiO}_2$ . Así, al aplicar un voltaje  $V_{BG}$  dará lugar a una carga eléctrica, obteniendo una relación de proporcionalidad entre la densidad de electrones  $n$  (o de huecos  $p$ ) y el voltaje aplicado a la back gate  $V_{BG}$ .

$$n - p = \frac{\epsilon(V_{BG} - V_D)}{ed} = \alpha(V_{BG} - V_D) \quad (3.20)$$

Por ejemplo en [83],  $\alpha \approx 7.2 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ V}^{-1}$  para un dieléctrico  $\text{SiO}_2$  de 300 nm de grosor. En la expresión Eq[3.20] se ha introducido  $V_D$  porque se toma como origen para el potencial, ya que constituye un eje de simetría para la densidad de portadores. Cuando el voltaje aplicado a la back gate es próximo al punto de neutralidad de carga, la densidad de portadores es menor que cuando nos alejamos, ya que idealmente la densidad de portadores es nula en el punto de Dirac. Lo anterior nos permite modificar la naturaleza de los portadores ( tipo electrón o hueco) al trabajar con tensiones  $V_{BG}$  superiores o inferiores al pico de Dirac  $V_D$ .

La resistividad  $\rho$  está asociada a dos componentes, una de largo alcance  $\rho_L$  y otra de corto alcance  $\rho_S$ :

$$\rho = \rho_L + \rho_S = \frac{1}{|n - p| e\mu} + cte \quad (3.21)$$

siendo  $\mu$  la movilidad de los electrones si  $V_{BG} > V_D$ , o bien la movilidad de huecos en caso contrario. La resistividad aunque parece tender a infinito al aproximarnos a  $V_D$ , sin embargo alcanza idealmente un valor máximo de  $h/4e^2 = 6.45 \text{ k}\Omega$  en dicho punto, el cual está asociado a una conductividad cuántica mínima. La conductividad  $\sigma = 1/\rho$  tiene la característica inversa a la resistividad, y nunca alcanzará el valor nulo. Además, la pendiente de las curvas  $\sigma = f(V_g)$  lejos del punto de Dirac, caracterizan a la movilidad.

### 3.4. Conductancia efectiva del GFET

En el GFET de la figura Fig. 3.1 los electrones circulan por el canal como partículas ultrarrelativistas sin masa sujetas al formalismo de Dirac [84]. Atraviesan una barrera de potencial  $U_o$  establecida por la puerta superior y

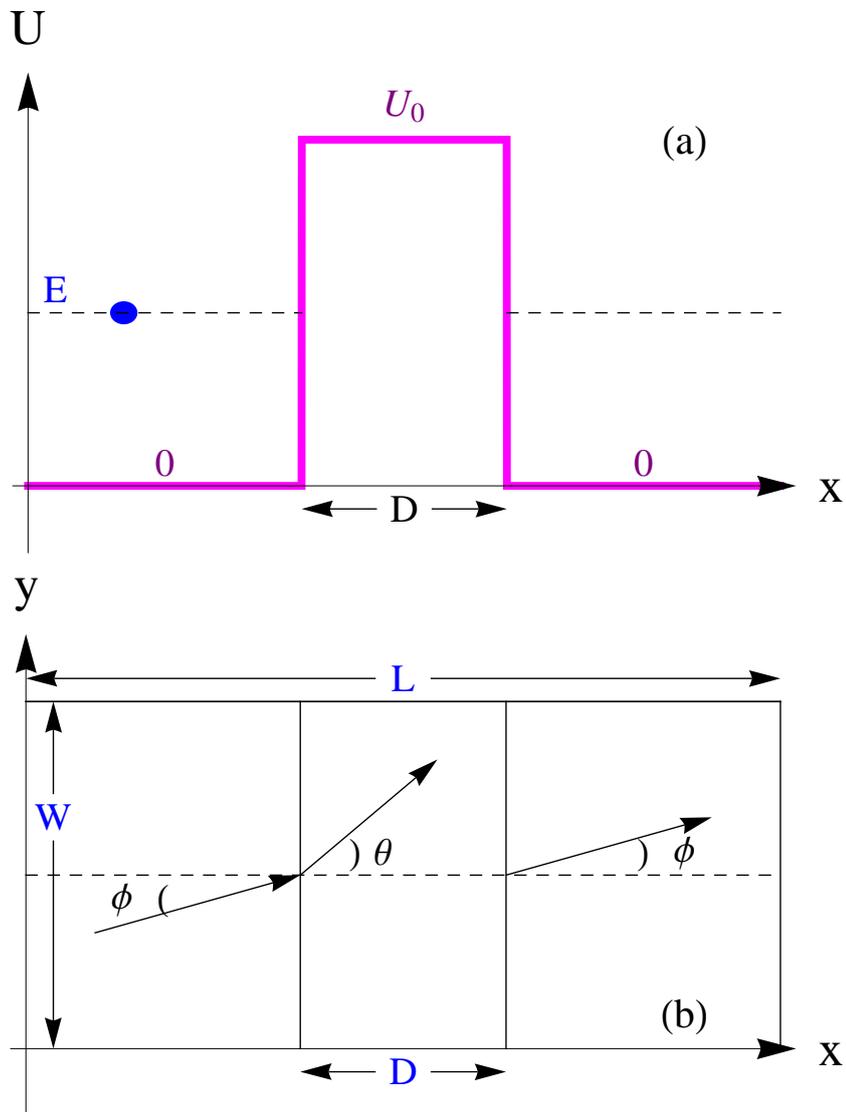


Figura 3.2: Energía de portadores versus posición en la lámina de grafeno (a). Ángulos de incidencia y transmisión de portadores sobre la barrera de potencial (b).

se transmiten por el dispositivo de acuerdo con el coeficiente de transmisión  $T(E, \phi)$  obtenido en el capítulo anterior [71]. El coeficiente de transmisión a través de la barrera de la figura Fig. 3.2, resulta ser:

$$T(E, U_0, D, \phi) = \left( 1 + U_0^2 \tan^2 \phi \frac{\sin^2 \left( \frac{D}{\hbar v_F} \sqrt{(E - U_0)^2 - E^2 \sin^2 \phi} \right)}{(E - U_0)^2 - E^2 \sin^2 \phi} \right)^{-1} \quad (3.22)$$

depende de características propias del portador de carga como son la energía  $E$ , y el ángulo de incidencia sobre la barrera de potencial  $\phi$ , y de parámetros propios de la barrera de potencial como son su altura  $U_0$  y su anchura  $D$ . No depende en absoluto de las dimensiones de la lámina de grafeno  $W$  y  $L$  (siempre que sus dimensiones permitan prescindir de los efectos de borde). El coeficiente de transmisión es simétrico respecto al ángulo de incidencia  $\phi$  y toma el valor 1 para incidencia normal, con independencia de los valores que puedan tomar el resto de los parámetros. Este es el caso de la paradoja de Klein para las partículas de Dirac [57, 62, 85], tal y como habíamos visto. Haciendo uso del coeficiente de transmisión en la ecuación Eq[3.22] construimos la conductancia efectiva de la muestra a baja temperatura y baja polarización en la expresión Eq[3.19]. Así, a temperaturas próximas a 0 K, la conductancia efectiva de este GFET en unidades de  $e^2/h$  (que es la conductancia básica cuantizada) es:

$$G_{eff} = \frac{2}{\hbar v_F \pi} |E_F| \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} T(E_F, U_0, D, \phi) \cos \phi d\phi \quad (3.23)$$

y explícitamente

$$G_{eff}(E_F, U_0, D) = \frac{4 |E_F|}{\hbar v_F \pi} \cdot \int_0^{\pi/2} \left( 1 + U_0^2 \tan^2 \phi \frac{\sin^2 \left( \frac{D}{\hbar v_F} \sqrt{(E_F - U_0)^2 - E_F^2 \sin^2 \phi} \right)}{(E_F - U_0)^2 - E_F^2 \sin^2 \phi} \right)^{-1} \cdot \cos \phi d\phi \quad (3.24)$$

La conductancia depende del potencial aplicado a la puerta superior (a través del coeficiente de transmisión), del potencial aplicado a la puerta inferior (a través de  $E_F$ ), y de la anchura de la lámina de grafeno Eq[3.16], pero no de su longitud Eq[3.17]. El máximo valor de la conductancia efectiva Eq[3.23] se alcanza para el valor máximo del coeficiente de transmisión  $T(E_F, U_0, D, \phi) = 1$ , y por tanto

$$G_{eff,max} = \frac{4}{\hbar v_F \pi} |E_F| \quad (3.25)$$

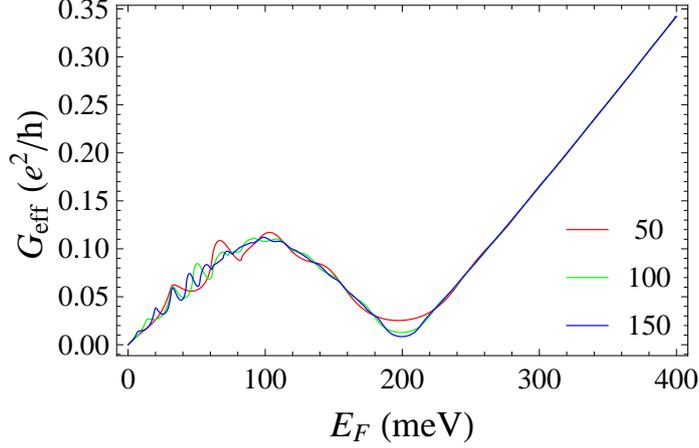


Figura 3.3: Conductancia efectiva frente a la energía de Fermi para una barrera de potencial de altura  $U_0 = 200$  meV y anchura  $D = 50$ (rojo),  $100$ (verde) and  $150$ (azul) nm. La conductancia tiene un máximo local en  $E_F = 0.5 \cdot U_0$ , un mínimo local en  $E_F = U_0$ , y a continuación crece linealmente para  $E_F \geq U_0$ .

La figura Fig. 3.3 muestra la conductancia frente a la energía de Fermi para algunos valores de parámetros, especificados en el pie de la figura. Usamos como unidades para la energía  $meV$ , y para las longitudes  $nm$  (adecuadas para una lámina nanométrica de grafeno), tomamos  $\hbar v_F = 658.2$  meV·nm y expresamos la conductancia en unidades proporcionales a  $e^2/h$ . Vemos que la conductancia efectiva tiene un máximo local cuando la energía de Fermi alcanza el valor  $E_F = 0.5 \cdot U_0$ . A energías superiores, la cantidad  $(E_F - U_0)^2 - E_F^2 \sin^2 \phi$  cambia el signo, pasando de positiva a negativa. Por ello, en la expresión Eq[3.24] el seno de esta cantidad se convierte en un seno hiperbólico, y la conductancia comienza a disminuir. Por tanto, la resistencia aumenta. Esta situación persiste hasta que se alcanza un mínimo local en  $E_F \simeq U_0$ . Cuando  $E_F$  es mayor que  $U_0$ , debido a que el coeficiente de transmisión tiende a ser unitario, la conductancia efectiva crece proporcionalmente a la energía de Fermi, de forma semejante a lo que habíamos obtenido en la ecuación Eq[3.25]. Observamos oscilaciones en la conductancia a energías de Fermi que verifican la condición  $E_F < U_0$ . En particular, para  $E_F < 0.5 \cdot U_0$ , existen varias oscilaciones, mientras que para valores de la energía de Fermi que verifican  $0.5 \cdot U_0 < E_F < U_0$  solamente existe una oscilación. Para valores

superiores, es decir, si  $E_F \gg U_0$ , la conductancia no depende del valor de la anchura de la barrera y varía linealmente con la energía de Fermi.

En la figura Fig. 3.4, donde se representa la conductancia efectiva frente al potencial de barrera para una energía de Fermi  $E_F = 100$  meV y anchura  $D = 50$ (rojo), 100(verde) y 150(azul) nm, se observa que a medida que  $U_0$  aumenta, para valores de  $U_0$  que satisfacen  $U_0 < E_F$ , la conductancia efectiva decrece linealmente y toma el mismo valor independientemente de la anchura de la barrera de potencial. Cuando  $U_0$  coincide con el valor de la energía de Fermi, aparece un mínimo local cuyo valor depende de la anchura de la barrera  $D$ . Para  $U_0 > E_F$ , la conductancia aumenta y a la vez aparecen oscilaciones cuya amplitud se incrementa a medida que disminuye la anchura de la barrera.

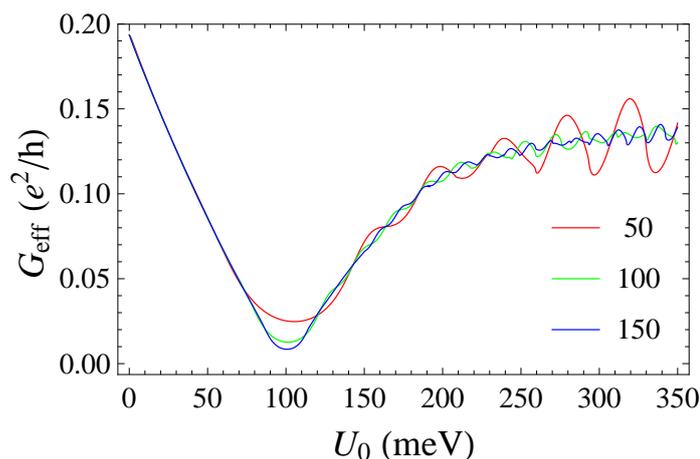


Figura 3.4: Conductancia efectiva frente a la altura de la barrera de potencial para una energía de Fermi  $E_F = 100$  meV y  $D = 50$ (rojo), 100(verde) y 150(azul) nm. Las tres curvas coinciden para  $U_0 < E_F$ , y presentan un mínimo en  $U_0 = E_F$ . La amplitud de las oscilaciones depende de la anchura de la barrera  $D$ .

La dependencia de la conductancia efectiva con la anchura de la barrera  $D$  se muestra en la figura Fig. 3.5. La conductancia disminuye hasta que se estabiliza, mediante oscilaciones, en torno a un valor constante. La amplitud de dichas oscilaciones tiende a disminuir a medida que la energía de Fermi aumenta.

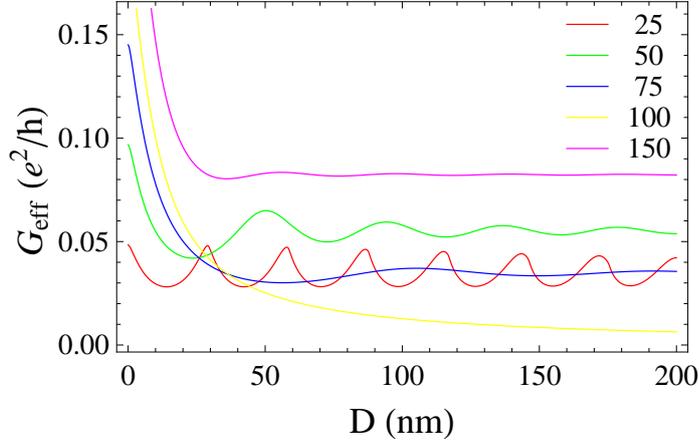


Figura 3.5: Conductancia efectiva frente a la anchura de la barrera, para  $U_0 = 100$  meV y energías de Fermi  $E_F = 25$ (rojo), 50(verde), 75(azul), 100(amarillo) y 150(fucsia) meV. La conductancia disminuye hasta que se estabiliza a través de oscilaciones, cuya amplitud disminuye a medida que  $E_F$  aumenta.

### 3.5. Conductancia efectiva ponderada

Hasta ahora hemos considerado que, durante el transporte de corriente, la probabilidad de impacto de los portadores sobre la barrera de potencial es la misma para cada ángulo de incidencia. Otros escenarios deberían ser considerados, en los cuales, debido a las inhomogeneidades del material o al diseño del dispositivo, los portadores fluyeran en su mayoría en torno a una cierta *dirección privilegiada* dada  $\phi_0$  o, con mayor generalidad, tuviéramos un conjunto de electrones cuyas direcciones de entrada estuvieran descritas por una cierta distribución de probabilidad  $P(\phi)$  representando el peso de una dirección dada en el colectivo de electrones. A continuación consideraremos algunos de estos diferentes escenarios por medio de una distribución de probabilidad dada [86], y estudiaremos el efecto de la misma sobre la conductancia efectiva del GFET. Naturalmente, esta función de probabilidad debe estar normalizada, y satisfacer por tanto la condición

$$\int_{-\pi/2}^{+\pi/2} P(\phi) d\phi = \pi \quad (3.26)$$

### 3.5.1. Distribución gaussiana

Consideramos primero el caso de una función de distribución de probabilidad gaussiana para el ángulo de incidencia. Esta suposición representa la idea de que el transporte es de naturaleza balística, y que existe una cierta inhomogeneidad que provoca procesos de dispersión dentro de la muestra, los cuales desvían a los portadores de su trayectoria balística, llevándolos a impactar contra la barrera de potencial con diversos ángulos de incidencia. Ya que no todos los portadores sufrirán los mismos procesos de dispersión, podemos asumir que la mayoría de los portadores impactarán en la barrera de potencial con un ángulo similar a  $\phi_0$ , aunque puede haber una cierta dispersión en la muestra que dirija algunos hacia direcciones diferentes con mayor o menor peso. Asumimos que el ángulo de incidencia de los portadores obedecerá a una función de distribución de probabilidad expresada por:

$$P(\phi) = c \exp\left(-\frac{(\phi - \phi_0)^2}{2a^2}\right) \quad (3.27)$$

El parámetro  $a$  de la función gaussiana determina la dispersión de la muestra abriendo o cerrando la distribución en torno a  $\phi_0$  y produce la distinción entre una muestra bastante homogénea (una campana gaussiana estrecha,  $a$  pequeño) y una muestra con muchas inhomogeneidades (una distribución ancha,  $a$  grande). Se puede esperar transporte balístico en el primer caso, muy centrado en torno a una cierta dirección preferente  $\phi_0$ , y un colectivo disperso en el segundo.

El parámetro  $c$ , que determina la altura de la gaussiana depende de  $a$ , ya que ambos deben verificar la condición de normalización Eq[3.28]. Como vemos en dicha expresión, a medida que  $c$  se hace cada vez menor,  $a$  se hace cada vez mayor y viceversa.

$$ac\sqrt{2\pi} \operatorname{Erf}\left(\frac{\pi}{2\sqrt{2}a}\right) = \pi \quad (3.28)$$

Cuando se considera este efecto, la conductancia efectiva del GFET Eq[3.23] debe ser ligeramente modificada multiplicando la contribución de cada dirección incidente por su peso estadístico. La conductancia efectiva para una distribución gaussiana  $G_g$  queda entonces, considerando  $\phi_0 = 0^\circ$  (cuando el coeficiente de transmisión es la unidad):

$$G_g(E_F, U_0, D, a, c) = \frac{2c}{\hbar v_F \pi} |E_F| \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} T(E_F, U_0, D, \phi) \cos \phi \exp\left(-\frac{\phi^2}{2a^2}\right) d\phi \quad (3.29)$$

La conductancia efectiva  $G_g$  muestra ahora un comportamiento diferente según se aprecia en las figuras Fig. 3.6-3.7.

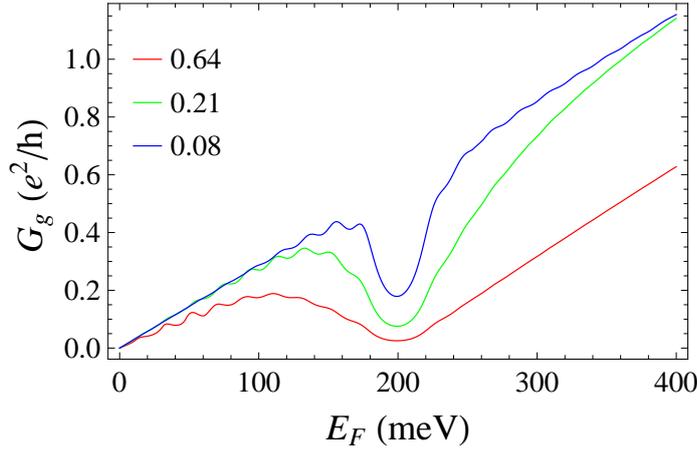


Figura 3.6: Conductancia frente a la energía de Fermi para una distribución gaussiana en la dirección de incidencia centrada en torno a  $\phi_0 = 0^\circ$ , de anchura  $a = 0.64$  (rojo),  $0.21$  (verde) y  $0.08$  (azul).  $U_0 = 200$  meV y  $D = 100$  nm. La conductancia crece con oscilaciones de manera aproximadamente lineal, hasta alcanzar un máximo local que depende de los parámetros utilizados. Posteriormente decae hasta  $E_F \sim U_0$ , para más adelante regresar a un crecimiento lineal.

La figura Fig. 3.6 muestra el comportamiento de la conductancia cuando varía la energía de Fermi mientras que las otras variables permanecen fijas. Inicialmente la conductancia aumenta a la vez que oscila hasta que alcanza un máximo local. El valor y la posición de este máximo depende de los parámetros de la función gaussiana utilizada. Posteriormente, la conductancia disminuye hasta que se alcanza un mínimo local cuando  $E_F \sim U_0$ . Una vez superado dicho mínimo, la conductancia se incrementará monótonamente. En la figura Fig. 3.7, cuando utilizamos  $U_0$  como variable mientras que los otros parámetros permanecen fijos en valores constantes, podemos ver que la conductancia efectiva disminuye hasta que alcanza un mínimo en torno a  $U_0 \sim E_F$ . También observamos que en funciones gaussianas más estrechas (lo cual es equivalente a una distribución con menos desorden), la variación de la conductancia es más pronunciada. Una vez que  $U_0$  supera el valor de  $E_F$ , observamos oscilaciones en la conductancia, cuya frecuencia tiende hacia valores  $\omega = 2D/\hbar v_F$ .

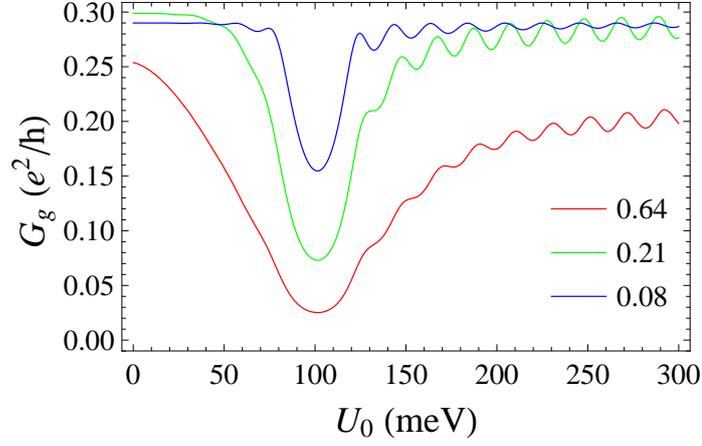


Figura 3.7: Conductancia frente a la altura de la barrera para una distribución gaussiana en la dirección de incidencia centrada en torno a  $\phi_0 = 0^\circ$ , de anchura  $a = 0.64$  (rojo),  $0.21$  (verde) y  $0.08$  (azul).  $E_F = 100$  meV y  $D = 100$  nm. Presenta un mínimo en torno a  $U_0 \sim E_F$ , que es tanto más profundo cuanto mayor sea el parámetro  $a$ .

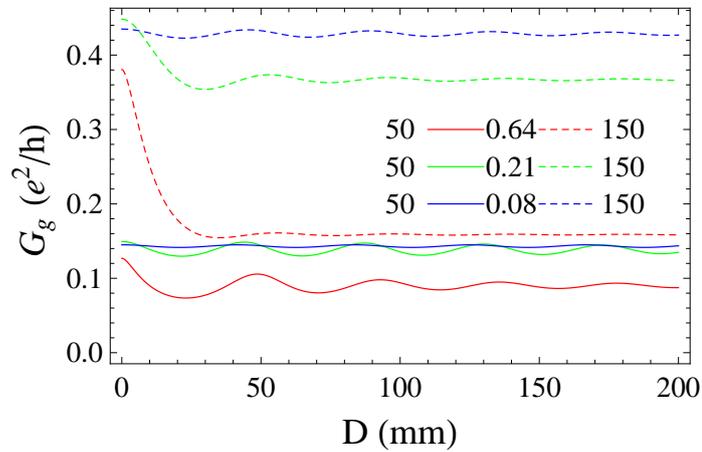


Figura 3.8: Conductancia frente a la anchura de la barrera para una distribución gaussiana en la dirección de incidencia centrada en torno a  $\phi_0 = 0^\circ$ , de anchura  $a = 0.64$  (rojo),  $0.21$  (verde) y  $0.08$  (azul).  $E_F = 50$  meV (línea continua) y  $150$  meV (línea discontinua).  $U_0 = 100$  meV. La conductancia presenta oscilaciones en torno a un valor constante, que es tanto menor cuanto mayor sea  $a$ .

La dependencia de la conductancia efectiva con la anchura de la barrera  $D$  para una distribución gaussiana centrada en  $0^\circ$  se muestra en la figura Fig. 3.8. Básicamente, la conductancia presenta oscilaciones en torno a un valor constante de la conductancia que se atenúan para barreras muy anchas. Para un valor dado de la energía de Fermi, a medida que el parámetro  $a$  disminuye, el valor promedio que alcanza la conductancia aumenta, respondiendo al hecho de que cuanto más aguda sea la distribución incidente de electrones, mayor importancia tendrá en la conductividad el efecto Klein.

Consideremos ahora el caso en el cual la distribución gaussiana está centrada en torno a  $\phi_0 \neq 0^\circ$ . Este ángulo  $\phi_0$  no nulo puede realizarse inclinando la orientación de la puerta superior en un dispositivo basado en grafeno como se muestra por ejemplo en [87]. En este caso  $\phi_0 \neq 0^\circ$ , la condición de normalización está dada por la expresión Eq[3.30]

$$ac\sqrt{\frac{\pi}{2}} \left( \text{Erf} \left( \frac{-2\phi_0 + \pi}{2\sqrt{2} \cdot a} \right) + \text{Erf} \left( \frac{2\phi_0 + \pi}{2\sqrt{2} \cdot a} \right) \right) = \pi \quad (3.30)$$

Como vemos en las figuras Fig. 3.9 y Fig. 3.10, los resultados son semejantes a aquellos obtenidos en el caso anterior  $\phi_0 = 0^\circ$ , pero los mínimos observados son ahora más anchos. De hecho, cuando  $a$  tiende a ser muy próxima a cero los mínimos llegarán a ser muy anchos. Se aprecia que a medida que la inhomogeneidad del medio disminuye junto con la dispersión de la distribución, el mínimo de conductancia se va haciendo más ancho, observándose así la apertura de un pseudogap de energía en que la conductancia decae abruptamente.

La dependencia de la conductancia efectiva con la anchura de la barrera  $D$  para una distribución gaussiana centrada en  $22.5^\circ$  se muestra en la figura Fig. 3.11. La forma que adquiere la conductancia en este caso es bien diferente para los dos valores de energía tomados como parámetros. Para  $E_F = 50$  meV presenta oscilaciones como en la figura Fig. 3.8, pero de amplitudes diferentes. Sin embargo, para  $E_F = 150$  meV apenas presenta oscilaciones.

### 3.5.2. Distribución delta

Consideramos a continuación el escenario extremo, en el cual la función gaussiana es tan estrecha que puede ser representada mediante una función delta Eq[3.31]. Representa el caso en el cual el material es ideal y todos los portadores impactan en la barrera con el mismo ángulo de incidencia,  $\phi_0$ .

$$P(\phi) = \delta(\phi - \phi_0) \quad (3.31)$$

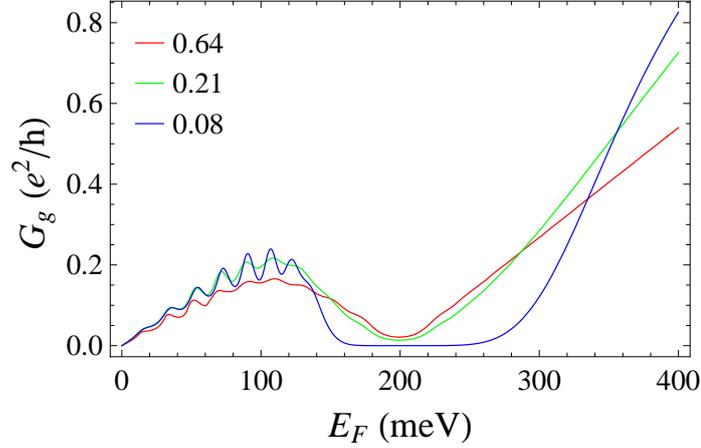


Figura 3.9: Conductancia frente a la energía de Fermi para una distribución gaussiana en la dirección de incidencia centrada en torno a  $\phi_0 = 22.5^\circ$ , de anchura  $a = 0.64$  (rojo),  $0.21$  (verde) y  $0.08$  (azul).  $U_0 = 200$  meV,  $D = 100$  nm. Para ángulos considerables, el mínimo se vuelve tanto más ancho cuanto menor sea el parámetro  $a$ .

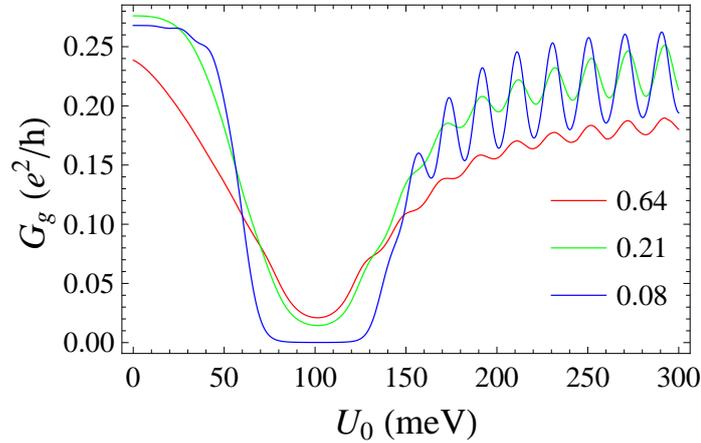


Figura 3.10: Conductancia frente a la altura de la barrera para una distribución gaussiana en la dirección de incidencia centrada en torno a  $\phi_0 = 22.5^\circ$ , de anchura  $a = 0.64$  (rojo),  $0.21$  (verde) y  $0.08$  (azul).  $E_F = 100$  meV,  $D = 100$  nm. Para ángulos considerables, el mínimo en torno a  $U_0 \sim E_F$  se puede convertir en un pseudogap dependiendo del parámetro  $a$  utilizado.

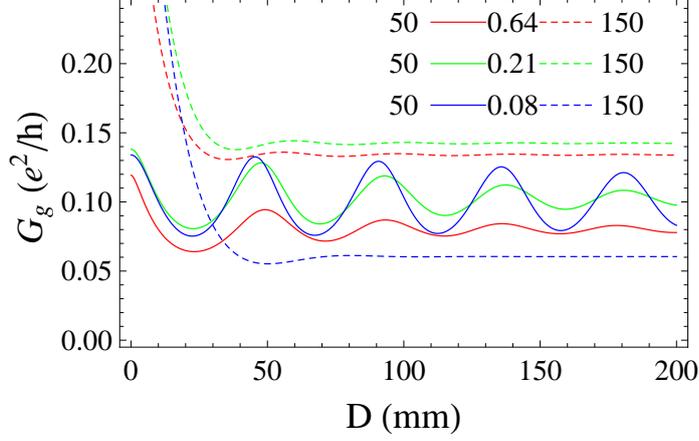


Figura 3.11: Conductancia frente a la anchura de la barrera para una distribución gaussiana en la dirección de incidencia centrada en torno a  $\phi_0 = 22.5^\circ$ , de anchura  $a = 0.64$  (rojo),  $0.21$  (verde) y  $0.08$  (azul).  $E_F = 50$  meV (línea continua) y  $150$  meV (línea discontinua),  $U_0 = 100$  meV. La conductancia tiende a un valor constante mediante oscilaciones o no, dependiendo del parámetro  $E_F$ .

En este caso, la conductancia efectiva está dada por:

$$G_{\delta,\phi_0}(E_F, U_0, D, \phi_0) = \frac{2|E_F|}{\hbar v_F} T(E_F, U_0, D, \phi_0) \cos \phi_0 \quad (3.32)$$

Observamos que ahora la conductancia efectiva depende del ángulo de incidencia, así como del resto de los parámetros considerados anteriormente (energía de Fermi  $E_F$ , altura de la barrera  $U_0$  y anchura de la barrera  $D$ ).

En particular, si la corriente fluye perpendicularmente a la barrera, el coeficiente de transmisión es igual a la unidad con independencia de la energía de Fermi y cualquiera que sea el valor de los otros parámetros de la barrera, como consecuencia de la paradoja de Klein [57, 62, 85]. Por tanto, la conductancia a  $\phi_0 = 0^\circ$  es directamente proporcional a la energía de Fermi

$$G_{\delta,0^\circ} = \frac{2}{\hbar v_F} |E_F| \quad (3.33)$$

Para incidencia no perpendicular, la conductancia presenta un *pseudogap efectivo* entre los valores de la energía de Fermi

$$\frac{U_0}{1 + \sin \phi_0} \leq E_F \leq \frac{U_0}{1 - \sin \phi_0} \quad (3.34)$$

obteniéndose un mínimo efectivo para  $E_F = U_0 / \cos^2 \phi_0$  (como mostramos en la figura Fig. 3.12), cuyo valor es

$$G_{\delta, \phi_0, \min} = \frac{2U_0}{\hbar v_F} \cosh^{-2} \left( \frac{DU_0 \tan \phi_0}{\hbar v_F} \right) \cos^{-1} \phi_0 \quad (3.35)$$

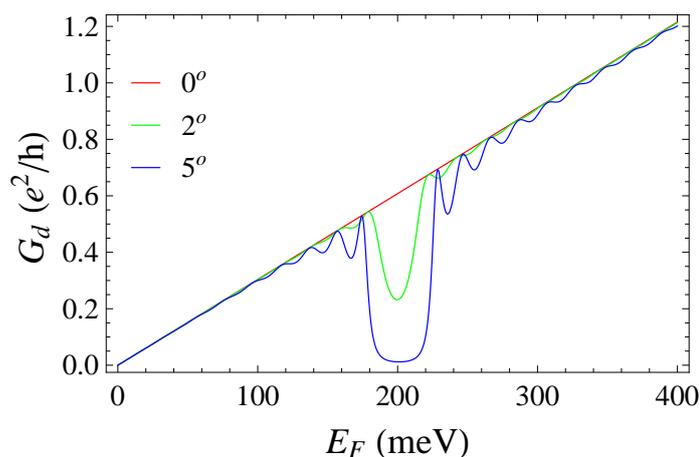


Figura 3.12: Conductancia efectiva frente a la energía de Fermi para una distribución tipo delta cuando la altura de la barrera es  $U_0 = 200$  meV y su anchura  $D = 100$  nm. Suponemos diferentes ángulos de incidencia :  $\phi_0 = 0^\circ$  (rojo),  $2^\circ$  (verde) y  $5^\circ$  (azul). Estas curvas son el caso límite de una gaussiana estrecha. A medida que aumenta  $\phi_0$ , el mínimo se hace más profundo, excepto por esto las gráficas son aproximadamente lineales.

En las figuras Fig. 3.12-3.14 representamos la conductancia efectiva para una distribución tipo delta y ángulos de incidencia extremadamente pequeños  $\phi_0 = 0^\circ$ ,  $2^\circ$  y  $5^\circ$ . En la figura Fig. 3.12 frente a la energía de Fermi, en la figura Fig. 3.13 frente a la altura de la barrera de potencial y en la figura Fig. 3.14 frente a la anchura de la barrera. El propósito de todo ello es, conociendo que  $T = 1$  para  $\phi_0 = 0^\circ$ , observar cómo al modificar el ángulo de entrada de los electrones en las figuras Fig. 3.12-3.13 va apareciendo un mínimo en la conductancia para una energía determinada. En la figura Fig. 3.14, la dependencia de la conductancia con la anchura de la barrera no muestra características destacables excepto por una pequeña oscilación cuya amplitud depende de la energía de Fermi.

En este escenario, en el cual asumimos una función de distribución de probabilidad tipo delta, podemos observar como un hecho muy notable en las

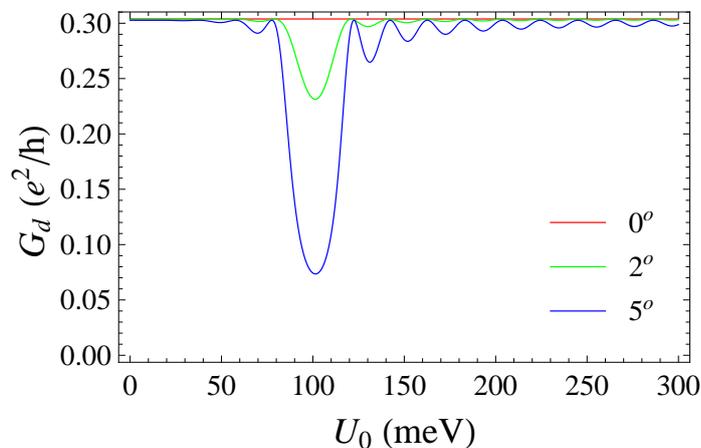


Figura 3.13: Conductancia efectiva frente a la altura de la barrera asumiendo una distribución tipo delta cuando la energía de Fermi es  $E_F = 100$  meV y la anchura de la barrera es  $D = 100$  nm. Estas representaciones suponen diferentes ángulos de incidencia  $\phi_0 = 0^\circ$ (rojo),  $2^\circ$ (verde) y  $5^\circ$ (azul). Las gráficas presentan un valor aproximadamente constante excepto para  $U_0 \sim E_F$ , donde aparece un mínimo, tanto más profundo cuanto mayor sea  $\phi_0$ .

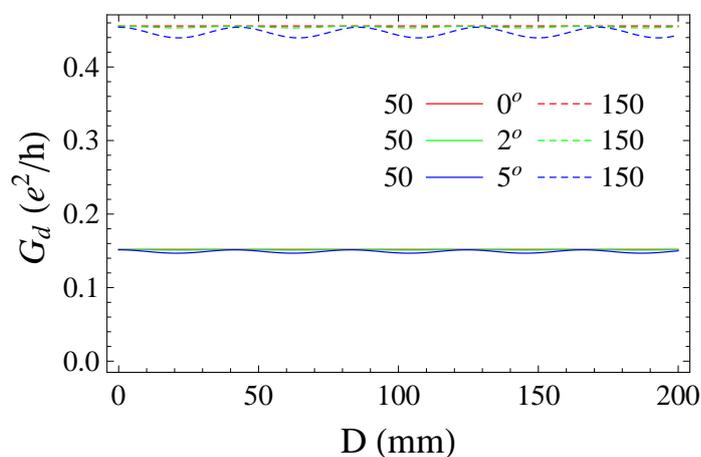


Figura 3.14: Conductancia efectiva frente a la anchura de la barrera asumiendo una distribución de probabilidad tipo delta para energías de Fermi  $E_F = 50$ (línea continua) y  $150$  meV(línea discontinua). La altura de la barrera de potencial es  $U_0 = 100$  meV, además hemos supuesto diferentes ángulos de incidencia :  $\phi_0 = 0^\circ$ (rojo),  $2^\circ$ (verde) y  $5^\circ$ (azul). Las gráficas toman valores aproximadamente constantes dependiendo básicamente de  $E_F$ .

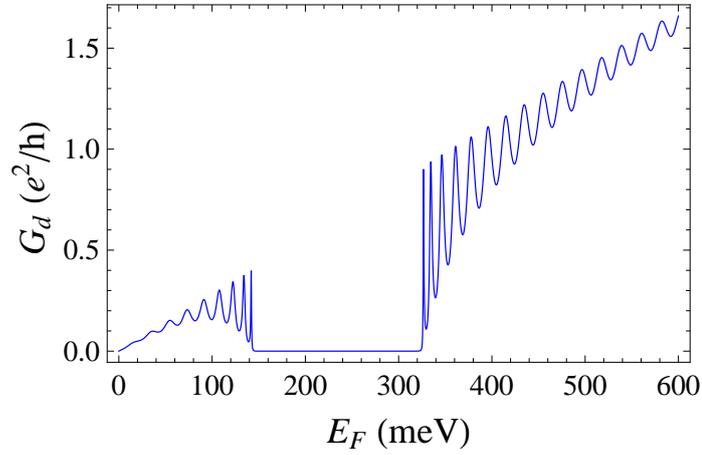


Figura 3.15: Conductancia efectiva frente a la energía de Fermi cuando asumimos una función de distribución de probabilidad tipo delta y un ángulo de incidencia  $\phi_0 = 22.5^\circ$ . La barrera de potencial se caracteriza por  $U_0 = 200$  meV y  $D = 100$  nm. Aparece claramente un pseudogap, con valores prácticamente nulos en él.

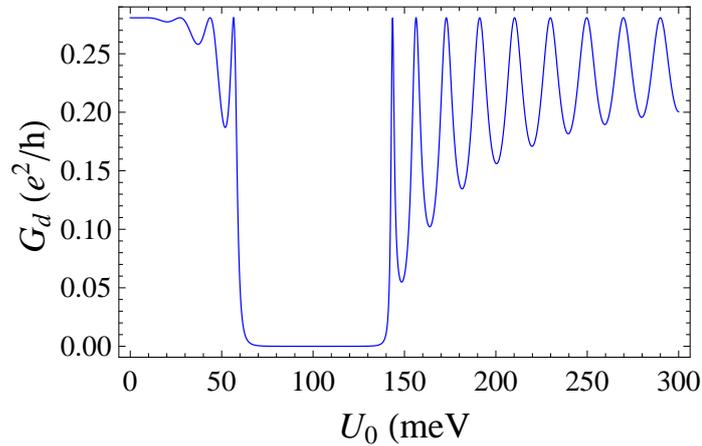


Figura 3.16: Conductancia frente a la altura de la barrera  $U_0$  cuando asumimos una función de distribución de probabilidad tipo delta y un ángulo de incidencia  $\phi_0 = 22.5^\circ$ , siendo los otros parámetros  $E_F = 100$  meV y  $D = 100$  nm. El mínimo centrado en  $U_0 \sim E_F$  toma valores aproximadamente nulos.

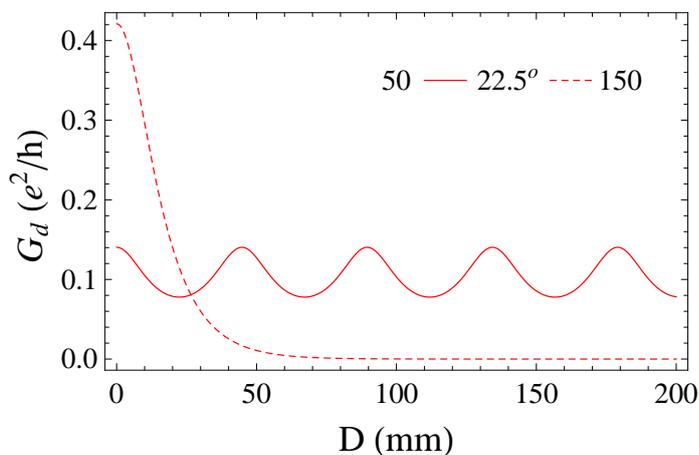


Figura 3.17: Conductancia frente a la anchura de la barrera asumiendo una función tipo delta centrada en torno a  $\phi_0 = 22.5^\circ$  para  $U_0 = 100$  meV, siendo  $E_F = 50$  (línea continua) y 150 meV (línea discontinua). Aparecen oscilaciones o no dependiendo de  $E_F$ .

gráficas lo que se acaba de describir analíticamente, la existencia de regiones de energía en las cuales la conductancia disminuye hasta valores próximos a cero. Se observa también que a medida que aumenta el ángulo de incidencia, este mínimo se hace cada vez más pronunciado y la región más extensa. En otras palabras, parece que el control de la direccionalidad de los electrones de entrada en el dispositivo puede utilizarse para provocar la apertura de un *pseudogap efectivo* en el GFET. En las figuras Fig. 3.15 y 3.16 para un ángulo de incidencia de  $\phi_0 = 22.5^\circ$  (o  $\pi/8$ ) se hace patente este efecto con la aparición del mínimo en la expresión Eq[3.35], con la conductancia prácticamente nula entre los dos valores extremos de la energía determinados en la relación Eq[3.34].

Es interesante destacar que tanto la anchura del pseudogap como su profundidad, pueden controlarse a voluntad con la altura de la barrera (relacionada con el voltaje aplicado en la puerta superior en el esquema del transistor mostrado en la figura Fig. 3.1), la anchura de la barrera y la dirección de entrada de los electrones en el dispositivo. El mínimo observado en la conductancia y la apertura del pseudogap como consecuencia, en la figura Fig. 3.15, evidencia que en ciertas condiciones el efecto túnel de Klein puede ser evitado, y que la construcción de un GFET efectivo basado en grafeno con una notable relación encendido/apagado podría ser factible. Creemos que una puerta superior no-perpendicular a la dirección fuente-drenador, puede

crear este pseudogap en una muestra de grafeno limpia y homogénea, sin impurezas [87]. También es posible controlar la dirección de incidencia de los portadores mediante guiado eléctrico como recoge Kim en [88].

### 3.6. Resumen y conclusiones

A lo largo de este capítulo hemos construido una *expresión cerrada* para describir la densidad de corriente y la conductancia de los GFET considerados. Esta expresión relaciona el coeficiente de transmisión, la densidad de corriente y la conductancia del dispositivo con los parámetros físicos que gobiernan el modelo. Hemos considerado varias simplificaciones en la densidad de corriente, que reproducen ciertas condiciones experimentales. En particular, baja polarización y baja temperatura para poder utilizarlo con un GFET. Las *variables experimentales* que controlan el coeficiente de transmisión, la corriente y la conductancia son los *potenciales externos aplicados a sus terminales* de: surtidor, drenador, puerta superior y puerta inferior. Éstos determinan el perfil de potencial y la energía de Fermi de los portadores de carga.

Con objeto de mejorar el rendimiento del GFET descrito y para evitar las propiedades triviales que condicionan un impacto perpendicular sobre la barrera de los portadores de corriente (efecto de Klein), hemos considerado un impacto no-perpendicular. Esta *direccionalidad* en la transmisión nos lleva a nuevas propiedades de la transmisión en el dispositivo. Hemos supuesto varios escenarios en la transmisión. Éstos se basan en un modelado de diferentes condiciones de dispersión en la muestra de portadores incidentes, que pueden ser atribuidas a diferentes grados de inhomogeneidad presentes en el medio (grafeno).

Atribuimos diferentes pesos estadísticos en el transporte a los electrones que impactan en una cierta dirección, y modelamos el colectivo de electrones entrantes utilizando diferentes funciones de ponderación, una función gaussiana primero (describiendo un gran número de inhomogeneidades en el medio), y una función delta después, que selecciona una única dirección de entrada  $\phi_0$  (sin inhomogeneidades) y corresponde a un haz incidente perfectamente colimado. Al analizar la conductancia asociada, hemos encontrado en este escenario que la paradoja de Klein puede ser soslayada induciéndose la creación de un pseudogap efectivo. La posición y la anchura del pseudogap de energía dependen de la altura de la barrera de potencial y de la dirección  $\phi_0$  de entrada de los electrones. Esta característica podría ser un

importante paso en el desarrollo de transistores basados en grafeno, siempre que podamos controlar la direccionalidad, ya que la ausencia de gap es una de las principales dificultades encontradas cuando tratamos de modular la corriente efectiva via la polarización. Creemos que una puerta superior no-perpendicular a la dirección fuente-drenador, puede crear este pseudogap en una muestra de grafeno limpia y homogénea, sin impurezas. Otra posibilidad para controlar la dirección de incidencia de portadores es mediante guiado eléctrico.



# Capítulo 4

## Transmisión a través de múltiples barreras de potencial

### 4.1. Introducción

Una vez estudiado el coeficiente de transmisión a través de una y dos barreras de potencial. Consideramos a continuación el cálculo del coeficiente de transmisión para varias barreras de potencial mediante el formalismo de Dirac, utilizando el *método de la matriz de transferencia*. El método de la matriz de transferencia (MMT) fue ampliamente utilizado en el transporte electrónico a través de heteroestructuras constituidas por semiconductores tradicionales tales como  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ , caracterizadas por la ecuación de Schrödinger, tal y como recoge Liu en [89, 90]. El método de la matriz de transferencia es un *método sencillo* para calcular el coeficiente de transmisión a través de múltiples barreras de potencial en una monocapa de grafeno. Se trata de un método numérico y analítico muy potente para justificar las propiedades de transporte en los sistemas, y además es computacionalmente muy fácil de implementar, ya que únicamente hay que considerar la multiplicación de matrices de dimensiones  $2 \times 2$ .

Pretendemos estudiar el comportamiento tanto de varias barreras de potencial, como de una barrera de potencial escalonada. Las primeras pueden llegar a fabricarse mediante un conjunto de electrodos aplicados al grafeno a través de los dieléctricos correspondientes [91], con un diseño constructivo semejante al utilizado para la fabricación de transistores de grafeno. La finalidad es utilizar varias puertas para obtener nanodispositivos versátiles, que puedan ser usados para distintas aplicaciones sin necesidad de cambiar su configuración. La segunda puede ser utilizada para simular el compor-

tamiento de potenciales que varíen suavemente [58, 92]. En nuestro caso lo aplicaremos a la aproximación para una barrera gaussiana.

Los resultados numéricos muestran que la probabilidad de transmisión depende de factores geométricos como las anchuras y las distancias de separación entre barreras así como del valor de potencial aplicado a las diferentes puertas (barreras de potencial), también de las características propias de los portadores como energía y ángulo de incidencia sobre la barrera de potencial, así como del número de barreras de potencial. Por ello cambiando la configuración de la estructura, las propiedades de transporte de los electrones pueden ser ajustadas adecuadamente a la aplicación que se pretenda. En particular, cabe destacar la aparición de pseudogaps con resonancias muy selectivas en energía cuando consideramos barreras de potencial de la misma altura. Así como una simetría especular y la posibilidad de ajustar independientemente los pseudogaps cuando las barreras sean de diferente altura.

## 4.2. Múltiples barreras de potencial

Consideremos múltiples barreras de energía potencial  $U_i(x)$  en una dimensión aplicadas a una lámina de grafeno monocapa, tal y como aparece en la figura Fig. 4.1. En dicha figura hemos detallado los coeficientes de cada una de las regiones de transmisión, así como su energía potencial. Una barrera de potencial genérica  $U_i$  estará comprendida entre  $x_{2i-1}$  y  $x_{2i}$ , con coeficientes asociados  $A_{2i}$  y  $B_{2i}$ . La región a su izquierda vendrá caracterizada por coeficientes  $A_{2i-1}$  y  $B_{2i-1}$ , y la región a su derecha por coeficientes  $A_{2i+1}$  y  $B_{2i+1}$ .

Recordando que  $\hat{H} = v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{p} + U(x)\hat{I}$ , y  $\psi_i(x, y) = \psi_i(x) \cdot e^{ik_y y}$ . La expresión general para una región libre, es decir donde no tengamos aplicada una barrera de potencial o bien sea nula, por ejemplo la zona  $2i-1$  es:

$$\psi_{2i-1}^A(x) = A_{2i-1}e^{ik_x x} + B_{2i-1}e^{-ik_x x} \quad (4.1)$$

$$\psi_{2i-1}^B(x) = s_{2i-1}(A_{2i-1}e^{i[k_x x + \phi]} - B_{2i-1}e^{-i[k_x x + \phi]}) \quad (4.2)$$

y para una región  $2i$  donde tengamos aplicada una barrera de potencial  $U_i$  no nula es:

$$\psi_{2i}^A(x) = A_{2i}e^{iq_{2i} x} + B_{2i}e^{-iq_{2i} x} \quad (4.3)$$

$$\psi_{2i}^B(x) = s_{2i}(A_{2i}e^{i[q_{2i} x + \theta_{2i}]} - B_{2i}e^{-i[q_{2i} x + \theta_{2i}]}) \quad (4.4)$$

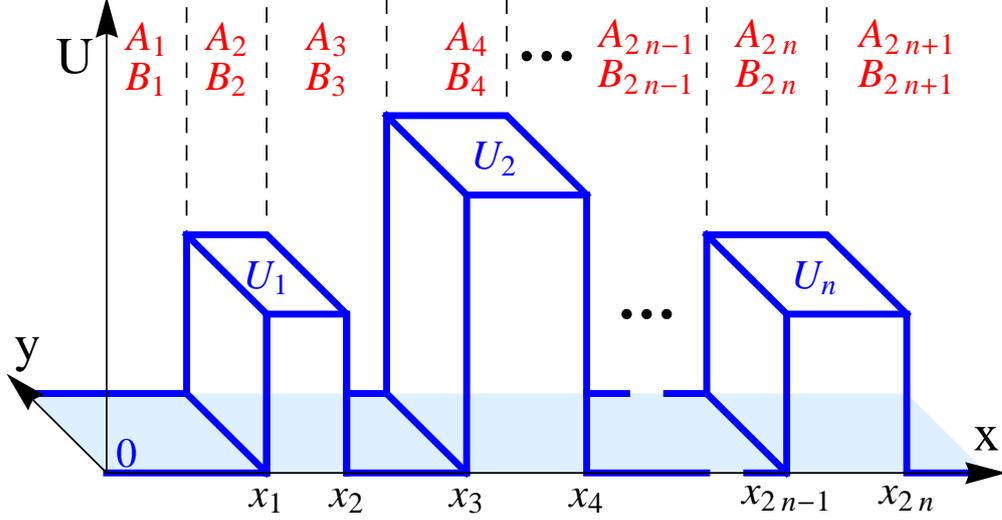


Figura 4.1: Estructura general para múltiples barreras de potencial a lo largo de la dirección  $x$ .

donde

$$k = \frac{E}{\hbar v_F}, \quad k_x = k \cos(\phi), \quad k_y = k \sin(\phi), \quad (4.5)$$

$$q_{2i_x} = \sqrt{\left(\frac{E - U_i}{\hbar v_F}\right)^2 - k_y^2}, \quad \theta_{2i} = \arctan\left(\frac{k_y}{q_{2i_x}}\right), \quad (4.6)$$

$$s = \text{sign}(E), \quad s_{2i} = \text{sign}(E - U_i), \quad (4.7)$$

siendo  $U_i$  la energía potencial de la barrera  $i$ -ésima.

De manera general, al atravesar los portadores la barrera  $i$ -ésima imponemos:

$$\psi_{2i-1}^A(x_{2i-1}) = \psi_{2i}^A(x_{2i-1}), \quad \psi_{2i-1}^B(x_{2i-1}) = \psi_{2i}^B(x_{2i-1}), \quad (4.8)$$

$$\psi_{2i}^A(x_{2i}) = \psi_{2i+1}^A(x_{2i}), \quad \psi_{2i}^B(x_{2i}) = \psi_{2i+1}^B(x_{2i}) \quad (4.9)$$

lo cual se traduce en las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} A_{2i-1} e^{ik_x x_{2i-1}} + B_{2i-1} e^{-ik_x x_{2i-1}} &= A_{2i} e^{iq_{2i_x} x_{2i-1}} + B_{2i} e^{-iq_{2i_x} x_{2i-1}}, \\ s(A_{2i-1} e^{i[k_x x_{2i-1} + \phi]} - B_{2i-1} e^{-i[k_x x_{2i-1} + \phi]}) & \\ &= s_{2i}(A_{2i} e^{i[q_{2i_x} x_{2i-1} + \theta_{2i}]} - B_{2i} e^{-i[q_{2i_x} x_{2i-1} + \theta_{2i}]}), \\ A_{2i} e^{iq_{2i_x} x_{2i}} + B_{2i} e^{-iq_{2i_x} x_{2i}} &= A_{2i+1} e^{ik_x x_{2i}} + B_{2i+1} e^{-ik_x x_{2i}} \\ s_{2i}(A_{2i} e^{i[q_{2i_x} x_{2i} + \theta_{2i}]} - B_{2i} e^{-i[q_{2i_x} x_{2i} + \theta_{2i}]}), & \\ &= s(A_{2i+1} e^{i[k_x x_{2i} + \phi]} - B_{2i+1} e^{-i[k_x x_{2i} + \phi]}), \end{aligned} \quad (4.10)$$

obteniendo así las matrices:

$$(P_i^1) = \begin{pmatrix} e^{ik_x x_{2i-1}} & e^{-ik_x x_{2i-1}} \\ s e^{i[k_x x_{2i-1} + \phi]} & -s e^{-i[k_x x_{2i-1} + \phi]} \end{pmatrix}, \quad (4.11)$$

$$(P_i^2) = \begin{pmatrix} e^{iq_{2i_x} x_{2i-1}} & e^{-iq_{2i_x} x_{2i-1}} \\ s_{2i} e^{i[q_{2i_x} x_{2i-1} + \theta_{2i}]} & -s_{2i} e^{-i[q_{2i_x} x_{2i-1} + \theta_{2i}]} \end{pmatrix}, \quad (4.12)$$

$$(P_i^3) = \begin{pmatrix} e^{iq_{2i_x} x_{2i}} & e^{-iq_{2i_x} x_{2i}} \\ s_{2i} e^{i[q_{2i_x} x_{2i} + \theta_{2i}]} & -s_{2i} e^{-i[q_{2i_x} x_{2i} + \theta_{2i}]} \end{pmatrix}, \quad (4.13)$$

$$(P_i^4) = \begin{pmatrix} e^{ik_x x_{2i}} & e^{-ik_x x_{2i}} \\ s e^{i[k_x x_{2i} + \phi]} & -s e^{-i[k_x x_{2i} + \phi]} \end{pmatrix}, \quad (4.14)$$

resultando

$$P_i^1 \begin{pmatrix} A_{2i-1} \\ B_{2i-1} \end{pmatrix} = P_i^2 \begin{pmatrix} A_{2i} \\ B_{2i} \end{pmatrix}, \quad (4.15)$$

$$P_i^3 \begin{pmatrix} A_{2i} \\ B_{2i} \end{pmatrix} = P_i^4 \begin{pmatrix} A_{2i+1} \\ B_{2i+1} \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

por lo que al atravesar la barrera  $i$ -ésima de potencial obtenemos:

$$(M_i) = (P_i^1)^{-1} \cdot (P_i^2) \cdot (P_i^3)^{-1} \cdot (P_i^4) \quad (4.17)$$

En general para  $n$  barreras de potencial, podemos relacionar los parámetros de la primera y de la última región mediante un conjunto de matrices

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} &= (M_1) \cdot (M_2) \cdot (M_3) \cdots (M_n) \begin{pmatrix} A_{2n+1} \\ B_{2n+1} \end{pmatrix} \\ &= (M_{total}) \begin{pmatrix} A_{2n+1} \\ B_{2n+1} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.18)$$

La ecuación anterior relaciona los coeficientes del estado de salida con los del estado de entrada. Estamos interesados en describir la situación en que entra un electrón en un estado puro propagándose hacia la derecha, parte de él se refleja y otra parte se va transmitiendo por las regiones intermedias, donde sufre reflexión y transmisión en las distintas superficies de separación hasta que emerge transmitiéndose hacia la derecha.

Entonces los valores que deben tomar los coeficientes en las regiones extremas son:

$$A_1 = 1, \quad B_1 = r, \quad A_{2n+1} = t, \quad B_{2n+1} = 0 \quad (4.19)$$

donde hemos supuesto que incide completamente toda la onda en la primera región  $A_1 = 1$ , y en la última región no puede haber reflexión, ya que es una zona libre  $B_{2n+1} = 0$ . Los coeficientes de reflexión y transmisión son  $r$  y  $t$ .

$$\begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = (M_{total}) \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.20)$$

De aquí obtenemos el coeficiente de transmisión

$$t = \frac{1}{M_{11}} \quad (4.21)$$

y puesto que en las regiones extremas no existen barreras de potencial, la probabilidad de transmisión es:

$$T = t \cdot t^* \quad (4.22)$$

#### 4.2.1. Barreras con idéntica energía potencial

Continuando con la notación, la anchura de la barrera de potencial  $i$ -ésima es  $L_i$  y la distancia entre la barrera de potencial anterior y la siguiente es  $D_i$ . En la figura Fig. 4.2 representamos el coeficiente de transmisión frente al ángulo de incidencia para 1 (a), 3 (b) y 5 (c) barreras de potencial, todas ellas con la misma energía potencial  $U_0 = 0.4$  eV, y misma anchura  $L = 20$  nm, con distancia de separación entre las barreras  $D = 30$  nm, para una energía del portador incidente  $E = 0.2$  eV. Observamos que el coeficiente de transmisión es diferente dependiendo del número de barreras consideradas. A medida que aumenta el número de barreras de potencial, la anchura angular de la zona cercana a  $\phi = 0^\circ$  donde  $T$  es próximo a la unidad, es más estrecha, ya que la disminución del coeficiente de transmisión comienza antes. Alguna resonancia que observamos para el caso de una barrera de potencial, se convierte en una zona con múltiples resonancias muy estrechas al aumentar el número de barreras de potencial, así como la aparición de nuevas resonancias tipo delta [93].

En la figura Fig. 4.3 tenemos cinco barreras de potencial idénticas - con la misma altura de barrera  $U_0$ , y la misma anchura 20 nm y misma distancia de separación 30 nm. Fijamos la energía de los electrones incidentes en dichas barreras de potencial en 0.1 eV, y con ello realizamos la gráfica de contorno del coeficiente de transmisión en función de la energía de la barrera de potencial  $U_0$  y del ángulo de incidencia  $\phi$ . Para incidencia perpendicular el coeficiente de transmisión  $T$  es la unidad, lo cual sabíamos que sucedería debido a la paradoja de Klein, también es unitario en las proximidades de  $\phi = 0$ , sin embargo en la zona angular opuesta  $\phi = \pi/2$  es nulo. En ciertos intervalos del ángulo de incidencia (en torno a  $3\pi/16$ ) aparecen alternativamente áreas (dependiendo de la altura de la barrera de potencial  $U_0$ ) con

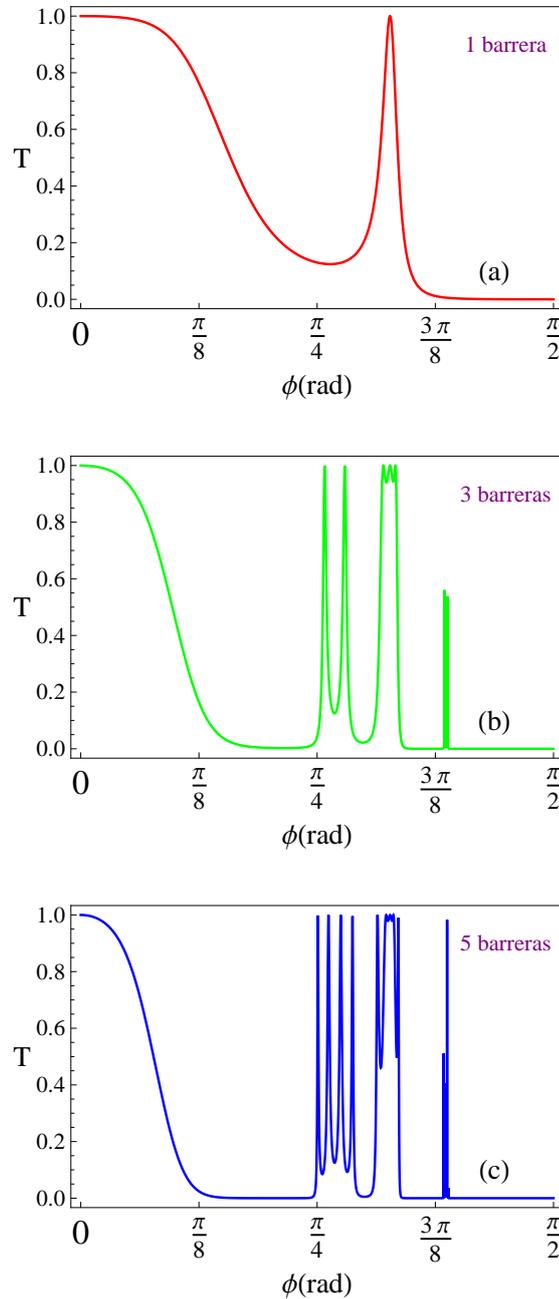


Figura 4.2: Coeficiente de transmisión frente al ángulo de incidencia para 1 (a), 3 (b) y 5 (c) barreras de potencial, siendo  $E = 0.2$  eV,  $U_0 = 0.4$  eV,  $L = 20$  nm y  $D = 30$  nm. A medida que aumenta el número de barreras de potencial, la zona angular próxima a la incidencia perpendicular donde  $T$  se aproxima a 1, disminuye.

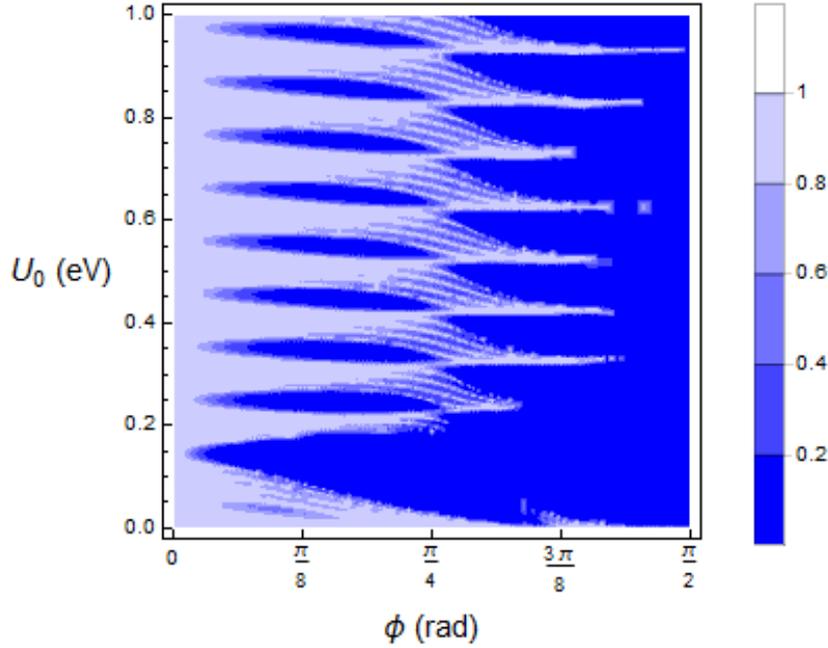


Figura 4.3: Gráfica de contorno para el coeficiente de transmisión de 5 barreras de potencial idénticas en función de  $U_0$  y del ángulo de incidencia, siendo  $E = 0.1$  eV,  $L = 20$  nm y  $D = 30$  nm. Para múltiples barreras de potencial idénticas aparece la formación de minibandas cuando los electrones inciden de manera oblicua.

fuertes oscilaciones en  $T$  para un ángulo de incidencia  $\phi$  fijo. Para un ángulo de incidencia ligeramente mayor, cada zona de transmisión se convierte en un conjunto de pequeñas minibandas. Al desplazarnos hacia ángulos aún mayores, algunos picos en la transmisión permanecen hasta que desaparecen para ángulos muy elevados. Así, para *múltiples barreras de potencial idénticas* hemos observado la *formación de minibandas de energía* para electrones que inciden de manera oblicua sobre las barreras de potencial.

En la figura Fig. 4.4 representamos la gráfica de contorno para el coeficiente de transmisión de un sistema constituido por 3 barreras de potencial de la misma altura  $U_0 = 0.4$  eV, misma anchura  $L = 10$  nm y misma distancia de separación  $D = 40$  nm, en función de la energía y del ángulo del portador incidente. Para un ángulo fijo  $\phi$ , claramente se observan zonas alternas de valor mínimo y máximo en el coeficiente de transmisión, a medida que aumenta la energía del portador incidente. Además observamos que el coeficiente de transmisión toma valores elevados para ángulos de incidencia

más grandes cuando la energía  $E$  es inferior a  $U_0$ .

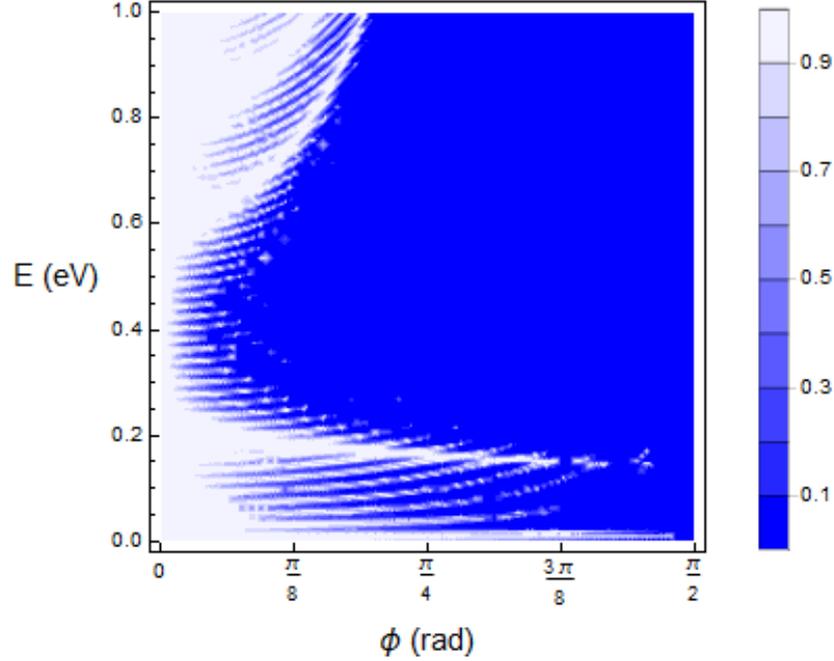


Figura 4.4: Gráfica de contorno para el coeficiente de transmisión de 3 barreras idénticas de potencial en función del ángulo de incidencia y de la energía del portador incidente, siendo  $U_0 = 0.4$  eV,  $L = 10$  nm y  $D = 40$  nm. Aparece la formación de zonas alternas de valor máximo y mínimo a un ángulo fijo, a medida que aumentamos la energía del portador incidente. Para  $E < U_0$  existen ángulos grandes con coeficiente de transmisión elevado.

Habíamos visto con anterioridad en la Sección 2.2 que cuando representamos el coeficiente de transmisión frente a la energía del electrón incidente para una barrera de potencial aparecía un pseudogap. Cuando el número de barreras idénticas aumenta, el intervalo de este pseudogap es básicamente el mismo. Para una barrera de potencial, como habíamos visto, el intervalo de energías en el cual tenemos este pseudogap es:

$$E_{min} = \frac{U_0}{1 + \sin \phi}, \quad E_{max} = \frac{U_0}{1 - \sin \phi} \quad (4.23)$$

por lo que la anchura energética del pseudogap es:

$$E_{off} = E_{max} - E_{min} = 2U_0 \sin \phi \cos^{-2} \phi \quad (4.24)$$

Así observamos que la anchura energética del pseudogap  $E_{off}$  en la ecuación Eq[4.24] solamente depende de la altura de la barrera de potencial y, en mayor medida del ángulo de incidencia de los electrones. O sea, es independiente de la anchura de las barreras de potencial y de la distancia de separación entre ellas. Este intervalo energético  $E_{off}$  depende más fuertemente del ángulo incidente  $\phi$ , que de la altura de la barrera de potencial  $U_0$ . En efecto, puesto que sin  $\phi$  varía entre 0 y 1,  $E_{min}$  varía entre  $U_0/2$  y  $U_0$ , mientras que  $E_{max}$  varía entre  $U_0$  e infinito. Es decir, la variación de  $E_{min}$  está acotada, pero la variación de  $E_{max}$  no. De ahí la variación tan acusada del intervalo energético  $E_{off}$  sobre todo con el ángulo de incidencia  $\phi$ .

Puesto que la energía de barrera es idéntica en todas ellas,  $U_0$ , el *aumento en el número de barreras de potencial* no influye sobre el intervalo energético del pseudogap, sin embargo produce un *aumento en el número de oscilaciones* y en el hecho de que sean *más pronunciadas*, en particular en la frontera entre el intervalo energético del pseudogap y las energías próximas a él. Lo anterior queda patente en la figura Fig. 4.5 (a) para 1 (línea punto-rayada), 3 (línea discontinua) y 5 (línea continua) barreras de potencial, considerando como parámetros  $U_0 = 0.4$  eV,  $\phi = \pi/10$ ,  $L = 20$  nm y  $D = 30$  nm. También cabe destacar que una diferencia importante entre el caso de una barrera de potencial y el de múltiples barreras de potencial es la aparición en este último caso de unas pocas *resonancias (tipo delta) altamente selectivas en energía* dentro del intervalo energético del pseudogap, lo cual también observamos en la figura.

A continuación si se aumenta el ángulo de incidencia hasta alcanzar el valor  $\pi/5$  como representamos en la figura Fig. 4.5 (b), siendo el resto de parámetros los mismos que teníamos en (a). Observamos que ahora las resonancias tipo delta en el intervalo energético del pseudogap parece que han desaparecido. Así mismo, aumenta la anchura del intervalo energético del pseudogap (como habíamos establecido según la ecuación Eq[4.23]). Además las oscilaciones para el coeficiente de transmisión son más pronunciadas, de tal forma que algunos mínimos alcanzan en su nivel inferior el valor de cero, convirtiéndose así en nuevos pseudogaps. En particular se observa claramente para el caso de cinco barreras idénticas y ángulo de incidencia  $\pi/5$  en la figura Fig. 4.5 (b).

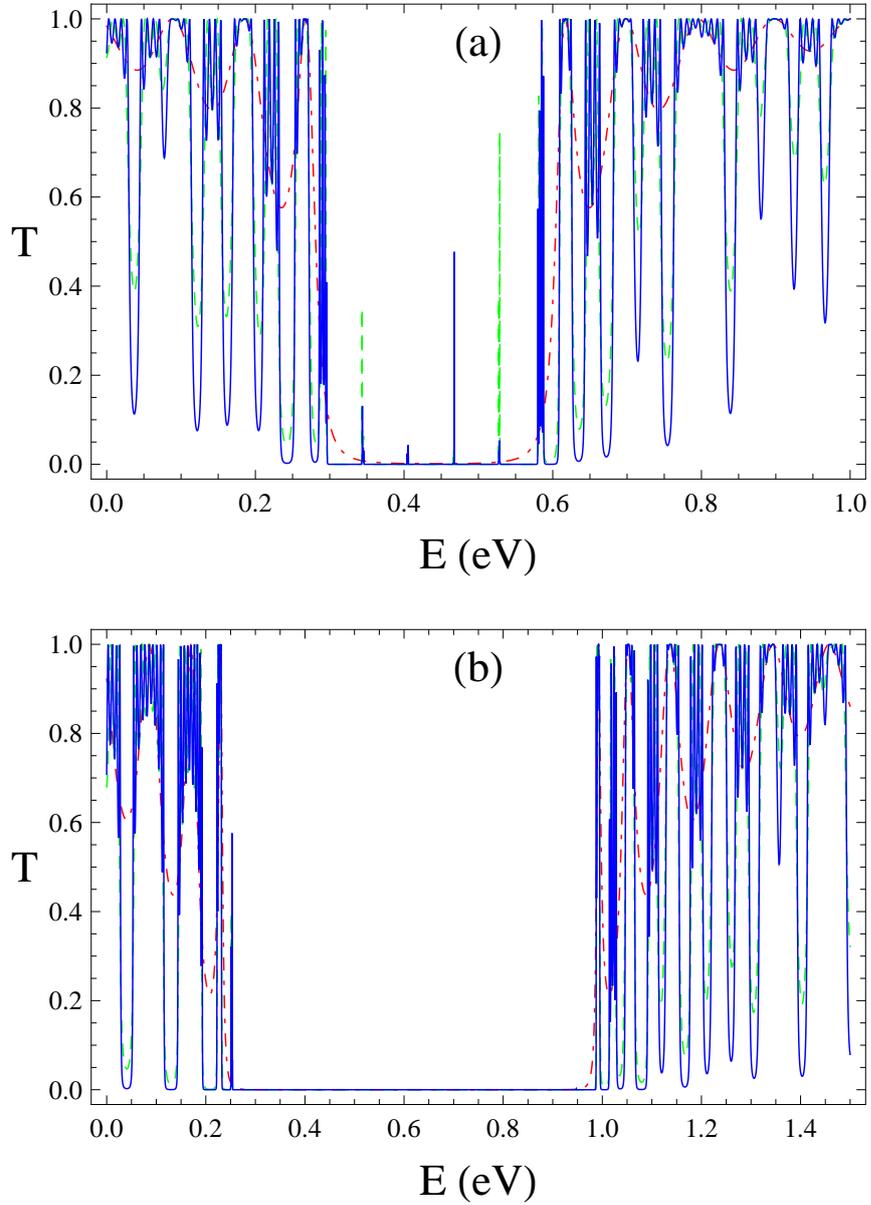


Figura 4.5: Coeficiente de transmisión frente a la energía del portador incidente para 1 (línea punto-rayada), 3 (línea discontinua) y 5 (línea continua) barreras de potencial, siendo  $U_0 = 0.4$  eV,  $L = 20$  nm,  $D = 30$  nm,  $\phi = \pi/10$  (a) y  $\pi/5$  (b). El aumento del número de barreras de potencial no influye sobre el intervalo energético del pseudogap, aparecen resonancias tipo delta dentro de él (a). Al aumentar el ángulo respecto a (a), aumenta el intervalo energético del pseudogap, las oscilaciones se hacen más profundas, apareciendo nuevas zonas de pseudogap (b).

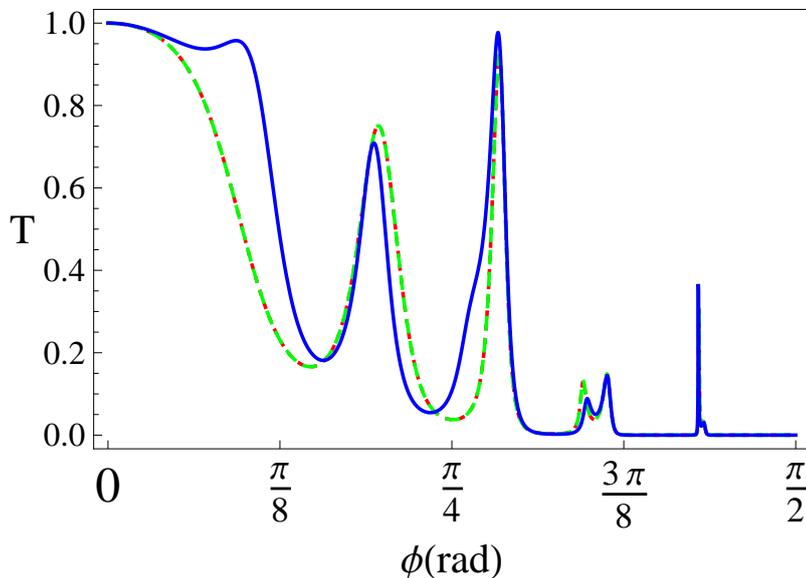


Figura 4.6: Coeficiente de transmisión frente al ángulo de incidencia para barreras de potencial de alturas  $U_1, U_2, U_3 = 0.2, 0.4, 0.6$  eV (línea punteada),  $0.6, 0.4, 0.2$  eV (línea discontinua),  $0.2, 0.6, 0.4$  eV (línea continua), siendo  $E = 0.1$  eV y  $L = D = 100$  nm. Solamente cuando el ordenamiento de las barreras de potencial de diferente altura, visto desde izquierda o derecha coincidan, se obtiene el mismo coeficiente de transmisión.

#### 4.2.2. Barreras con diferente energía potencial

Los resultados obtenidos en las expresiones Eq[4.11-4.22] pueden aplicarse también al caso de múltiples barreras con altura diferente. Creemos conveniente aclarar que, en este caso, *el orden de las barreras es significativo*. En el caso particular de dos barreras de potencial el resultado es independiente del orden en el cual las coloquemos, ya que portadores incidiendo desde sentidos contrarios, perciben igual el potencial. Sin embargo, si el número de barreras es tres o superior a tres, el coeficiente de transmisión dará el mismo resultado siempre que exista una *simetría especular*, es decir el *orden* en el cual colocamos las barreras de potencial mirando desde el extremo izquierdo coincida con el orden de colocación de dichas barreras cuando miramos desde el extremo derecho.

Para tres barreras hay sólo tres disposiciones diferentes según se ilustra en la Fig. 4.6 donde representamos diferentes ordenes de colocación de tres

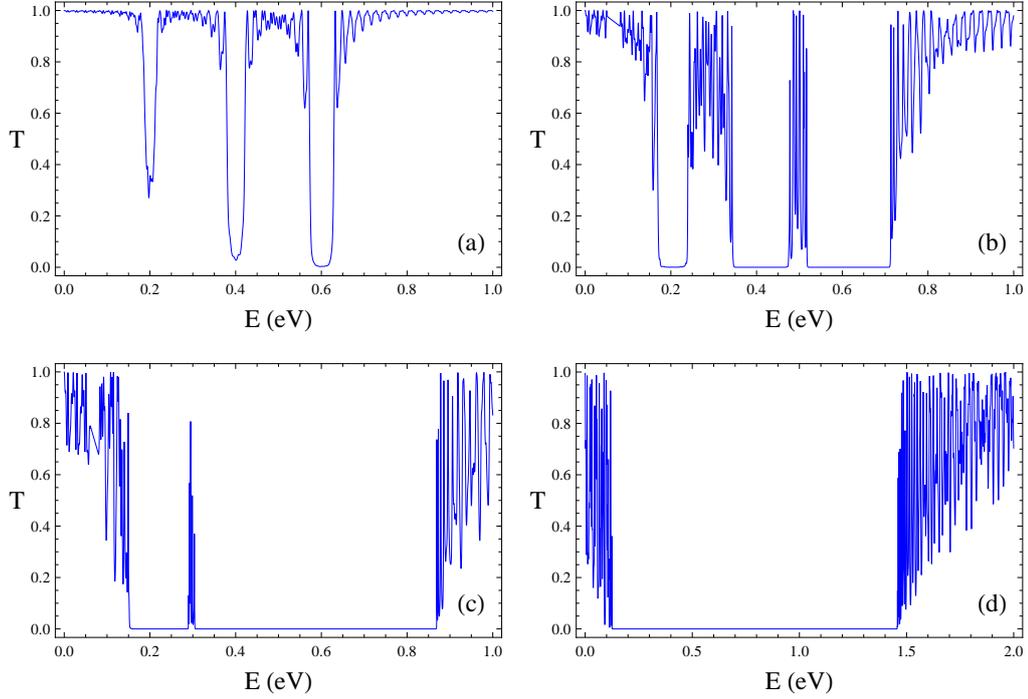


Figura 4.7: Coeficiente de transmisión frente a la energía del portador incidente para tres barreras de potencial de alturas  $U_1, U_2, U_3 = 0.2, 0.4, 0.6$  eV siendo  $L = D = 100$  nm y  $\phi = \pi/80$  (a),  $\pi/20$  (b),  $\pi/10$  (c),  $\pi/5$  (d) radianes. En (a) observamos un mínimo asociado a cada barrera de potencial. Al aumentar el ángulo de incidencia  $\phi$ , los mínimos se convierten en pseudogaps (b). Al aumentar aún más  $\phi$ , los pseudogaps segundo y tercero, colapsan en un único pseudogap en (c). Al continuar con el aumento de  $\phi$ , sucede que todos los pseudogaps colapsan en un único pseudogap (d).

barreras de potencial siendo  $E = 0.1$  eV y  $L = D = 100$  nm. Observamos que el caso de las barreras  $U_1, U_2, U_3 = 0.2, 0.4, 0.6$  eV (línea punteada) da el mismo resultado que el caso  $U_1, U_2, U_3 = 0.6, 0.4, 0.2$  eV (línea discontinua). Ambos casos son diferentes al caso  $U_1, U_2, U_3 = 0.2, 0.6, 0.4$  eV (línea continua) y también al caso  $U_1, U_2, U_3 = 0.4, 0.2, 0.6$  eV. Por ello, para tres barreras de potencial de diferentes alturas solamente existen tres casos de *ordenamiento diferente*, y tres coeficientes de transmisión distintos.

Cuando tenemos barreras de potencial con diferentes alturas y representamos el coeficiente de transmisión frente a la energía del electrón incidente, en principio obtenemos una zona de transmisión mínima asociada a cada una

de estas barreras de potencial, como podemos ver en la figura Fig. 4.7 (a). En dicha gráfica representamos tres barreras de potencial de valores  $U_1, U_2, U_3 = 0.2, 0.4, 0.6$  eV coincidiendo la anchura de la barrera  $L$  con la distancia de separación entre barreras  $D$ , ambas de 100 nm y siendo el ángulo de incidencia  $\phi = \pi/80$  radianes. Observamos que los valores de  $U_1, U_2$  y  $\phi$  que hemos asignado, no alcanzan un valor suficientemente elevado como para que obtengamos un pseudogap en el coeficiente de transmisión asociado a cada una de estas tres barreras de potencial. Es decir, los mínimos no llegan a caer en su parte inferior a un valor prácticamente nulo. En (b) conservamos los parámetros que teníamos, y únicamente modificamos el ángulo de incidencia, aumentándolo a un valor  $\phi = \pi/20$  radianes. Ahora con un ángulo de incidencia mayor, observamos tres pseudogaps perfectamente formados, cada uno de los cuales está asociado a una barrera de potencial. Los valores de energía inicial y final de dichos pseudogaps están dados por la expresión Eq[4.23], siendo ahora  $U_o$  la altura de cada barrera  $U_i$ . El límite superior del pseudogap varía mucho más que el límite inferior del pseudogap, con respecto al ángulo de incidencia. Debido a esto, puede llegar a suceder que el límite superior de un pseudogap alcance, o supere, el límite inferior en energía del siguiente pseudogap. Entonces, ambos pseudogaps colapsarán en un único pseudogap. Si mantenemos fijas las diferentes alturas de las barreras, esto sucederá para un cierto ángulo de incidencia. En (b) esto sucederá si aumentamos el ángulo de incidencia hasta  $\phi = \pi/15.6$  radianes, y para ángulos superiores a éste. El nuevo pseudogap es más ancho energéticamente, tal y como vemos en la figura (c). En dicho caso hemos representado el coeficiente de transmisión para  $\phi = \pi/10$  radianes, manteniendo el resto de los parámetros anteriores. Observamos que el segundo y tercer pseudogap han colapsado en un único pseudogap. Así, si seguimos con este proceso de ir incrementando el ángulo de incidencia, llegaremos a tener un único pseudogap, como representamos en (d). En dicha figura, el ángulo de incidencia alcanza  $\phi = \pi/5$  radianes, manteniendo el resto de los parámetros anteriores, con los cuales venimos trabajando. Para este único pseudogap, el extremo inferior está asociado a la barrera de menor energía potencial, y el extremo superior a la barrera de mayor energía potencial, ya que el ángulo de incidencia es el mismo. Si solamente hubieramos considerado una barrera de potencial de altura 0.6 eV y  $\phi = \pi/5$  - en vez de tres barreras de potencial de diferentes alturas -, el resultado hubiera sido un pseudogap con el mismo extremo energético superior, y distinto extremo energético inferior. Para que los extremos de un pseudogap se puedan *ajustar independientemente*, son necesarias al menos, dos barreras de potencial diferentes.

En la figura Fig. 4.8 representamos el coeficiente de transmisión para tres barreras de potencial, dos de ellas a distintas alturas  $U_1 = 0.2$  eV,  $U_2$

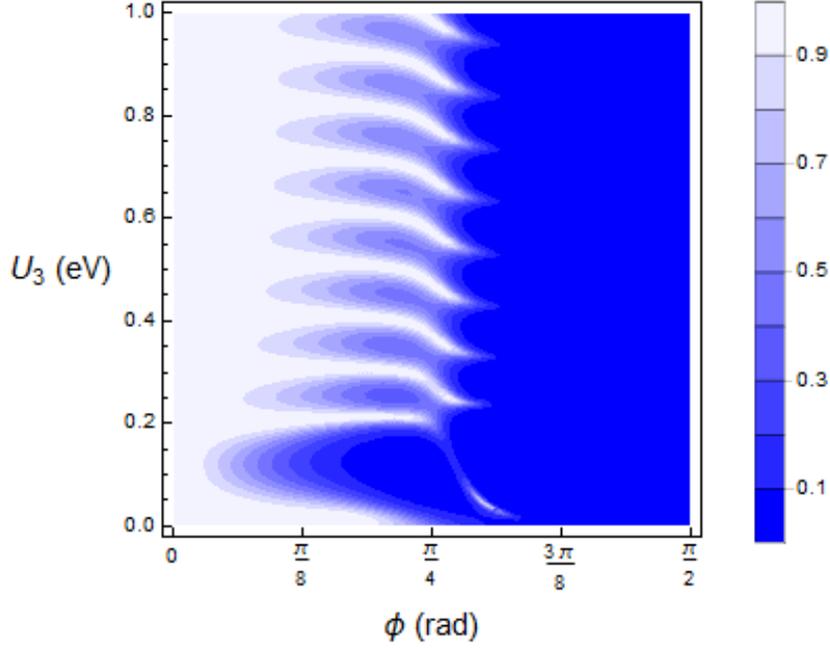


Figura 4.8: Gráfica de contorno representando el coeficiente de transmisión para tres barreras de potencial de idénticas dimensiones físicas  $L = 20$  nm,  $D = 30$  nm, siendo  $U_1 = 0.2$  eV,  $U_2 = 0.4$  eV, y  $E = 0.1$  eV. Para ángulos de incidencia  $\phi$  próximos a 0 radianes el coeficiente de transmisión es máximo, mientras que en el extremo contrario es mínimo. Existe un intervalo  $[3\pi/32, 10\pi/32]$  radianes donde se alternan valores máximos y mínimos para el coeficiente de transmisión a medida que  $U_3$  aumenta.

$= 0.4$  eV, y una tercera  $U_3$  sintonizable en un rango comprendido entre 0 y 1 eV. Asumimos fija la energía del electrón incidente  $E = 0.1$  eV, y las dimensiones físicas  $L = 20$  nm y  $D = 30$  nm idénticas para todas las barreras de potencial. En nuestra gráfica, las variables independientes son el valor de la altura de la tercera barrera de potencial así como el ángulo de incidencia del portador incidente (entre 0 y  $\pi/2$  radianes), obteniendo diferentes valores del coeficiente de transmisión que serán máximos ( $T = 1$ ) en torno a  $\phi = 0$  radianes, y nulos al aproximarnos al extremo contrario  $\phi = \pi/2$  radianes. Entre ambas zonas, aproximadamente en el intervalo de ángulos de incidencia comprendido entre  $3\pi/32$  y  $10\pi/32$  radianes observamos que existe cierta periodicidad en la gráfica asociada a los valores de  $U_3$ , alternándose valores elevados y pequeños para el coeficiente de transmisión. Todo esto sucede, una vez que  $U_3$  ha superado la energía del electrón incidente.

### 4.3. Barrera de potencial escalonada

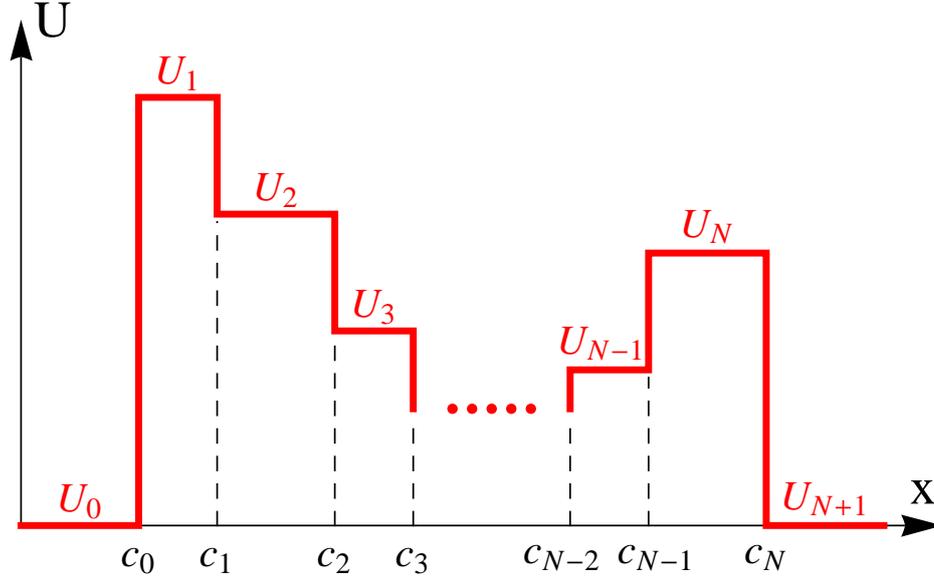


Figura 4.9: Estructura general para múltiples barreras contiguas de potencial a lo largo de la dirección  $x$ .

Consideremos ahora múltiples barreras ( $N$ ) aplicadas a una lámina de grafeno monocapa. La altura de la barrera en una región entre posiciones contiguas  $c_{j-1}$  y  $c_j$  es  $U_j$ , según se ilustra en la figura Fig. 4.9. La región de entrada de los portadores es la región (0), y la de salida la región ( $N + 1$ ), donde la altura de las barreras son nulas. El portador, que entra en la lámina por la zona (0) con energía  $E$  y momento  $\{k_x[0], k_y\}$  desplazándose hacia la derecha, viene descrito por una función de onda  $e^{ik_y y} \psi_j(x)$  cuya componente  $x$  es la dada por:

$$\psi_j(x) = A_j \left( \begin{array}{l} \text{If } [k_x[j] = 0, 1, e^{ik_x[j]x} \sqrt{k_-[j]}] \\ s_j \text{If } [k_x[j] = 0, i, e^{ik_x[j]x} \sqrt{k_+[j]}] \end{array} \right) + B_j \left( \begin{array}{l} \text{If } [k_x[j] = 0, k_y x, e^{-ik_x[j]x} \sqrt{k_+[j]}] \\ s_j \text{If } [k_x[j] = 0, k_y x - 1, -e^{-ik_x[j]x} \sqrt{k_-[j]}] \end{array} \right) \quad (4.25)$$

siendo  $k_{\pm}[j] = k_x[j] \pm ik_y$  y

$$k_y = \frac{E}{\hbar v_F} \sin(\phi), \quad (4.26)$$

$$k_x[j] = \sqrt{\left(\frac{E - U_j}{\hbar v_F}\right)^2 - k_y^2}, \quad (4.27)$$

$$s_j = \text{sign}(E - U_j), \quad U_0 = U_{N+1} = 0. \quad (4.28)$$

Se ha introducido la condición en las funciones con el fin de evitar errores en el cálculo numérico para los valores de energía incidente para los que  $k_x[j] = 0$ , en cuyo caso la E.D.O. que determina la solución se hace singular. En este caso, la solución es una función lineal en lugar de una exponencial [14], que resulta necesaria en el caso mencionado. Al atravesar los portadores la superficie que separa la región  $j$  de la  $j + 1$  se debe cumplir:

$$\psi_j(c_j) = \psi_{j+1}(c_j) \quad (4.29)$$

lo cual se traduce en las siguientes expresiones, que establecen la relación entre los coeficientes de la función de entrada sobre el límite  $x = c_j$  y los de salida:

$$\begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ik_x[j+1]c_j} & 0 \\ 0 & e^{ik_x[j+1]c_j} \end{pmatrix} \frac{\begin{pmatrix} P_{11}[j] & P_{12}[j] \\ P_{21}[j] & P_{22}[j] \end{pmatrix}}{\text{If}[k_x[j+1]=0,1,2k_x[j+1]]} \begin{pmatrix} e^{ik_x[j]c_j} & 0 \\ 0 & e^{-ik_x[j]c_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} \quad (4.30)$$

siendo

$$\begin{aligned} P_{11}[j] &= \text{If}[k_x[j] = 0, 1, \sqrt{k_-[j]}] \text{If}[k_x[j+1] = 0, 1 - k_y c_j, \sqrt{k_-[j+1]}] + \\ &+ s_j s_{j+1} \text{If}[k_x[j] = 0, 1, -i\sqrt{k_+[j]}] \text{If}[k_x[j+1] = 0, k_y c_j, i\sqrt{k_+[j+1]}] \\ P_{12}[j] &= \text{If}[k_x[j] = 0, k_y c_j, \sqrt{k_+[j]}] \text{If}[k_x[j+1] = 0, 1 - k_y c_j, \sqrt{k_-[j+1]}] + \\ &+ s_j s_{j+1} \text{If}[k_x[j] = 0, k_y c_j - 1, i\sqrt{k_-[j]}] \text{If}[k_x[j+1] = 0, k_y c_j, i\sqrt{k_+[j+1]}] \\ P_{21}[j] &= \text{If}[k_x[j] = 0, 1, \sqrt{k_-[j]}] \text{If}[k_x[j+1] = 0, 1, \sqrt{k_+[j+1]}] - \\ &- s_j s_{j+1} \text{If}[k_x[j] = 0, 1, -i\sqrt{k_+[j]}] \text{If}[k_x[j+1] = 0, 1, i\sqrt{k_-[j+1]}] \\ P_{22}[j] &= \text{If}[k_x[j] = 0, k_y c_j, \sqrt{k_+[j]}] \text{If}[k_x[j+1] = 0, 1, \sqrt{k_+[j+1]}] - \\ &- s_j s_{j+1} \text{If}[k_x[j] = 0, k_y c_j - 1, i\sqrt{k_-[j]}] \text{If}[k_x[j+1] = 0, 1, i\sqrt{k_-[j+1]}] \end{aligned} \quad (4.31)$$

La matriz de transmisión completa, que proporciona a través de sus coeficientes el estado de salida en la zona  $(N + 1)$  para un estado cualquiera de entrada en la zona  $(0)$ , se obtiene a partir de las matrices anteriores como

$$\begin{pmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ik_x[N+1]c_N} & 0 \\ 0 & e^{ik_x[N+1]c_N} \end{pmatrix} \cdot M \cdot \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} \quad (4.32)$$

con

$$M = M_N \cdot M_{N-1} \cdot M_{N-2} \cdots M_2 \cdot M_1 \cdot M_0 \quad (4.33)$$

y

$$M_j = \frac{1}{\text{If}[k_x[j+1]=0,1,2k_x[j+1]]} \begin{pmatrix} P_{11}[j] & P_{12}[j] \\ P_{21}[j] & P_{22}[j] \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e^{ik_x[j]\text{If}[j=0,c_j,(c_j-c_{j-1})]} & 0 \\ 0 & e^{-ik_x[j]\text{If}[j=0,c_j,(c_j-c_{j-1})]} \end{pmatrix} \quad (4.34)$$

$$\text{con } \text{Det}[M] = s_i s_{i+1} \frac{k_x[0]}{k_x[N+1]}.$$

Las ecuaciones anteriores Eq[4.32-4.34] relacionan los coeficientes del estado de salida con los del estado de entrada. Estamos interesados en describir la situación en que entra un portador en un estado puro propagándose hacia la derecha, parte del cual se refleja y la otra parte se va transmitiendo por las regiones intermedias, donde sufre reflexión y transmisión en las distintas superficies de separación, hasta que emerge transmitiéndose exclusivamente hacia la derecha. Entonces, los valores que deben tomar los coeficientes en las regiones extremas son:

$$A_0 = 1, \quad B_0 = r, \quad A_{N+1} = t, \quad B_{N+1} = 0 \quad (4.35)$$

siendo  $r$  y  $t$  los coeficientes de reflexión y transmisión.

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} \quad (4.36)$$

y, como en las regiones extremas no existen barreras de potencial, resulta obviamente que  $\text{Det}[M] = 1$  y obtenemos el coeficiente de transmisión total  $T$  de la heteroestructura como

$$t = \frac{1}{M_{22}}, \quad T = t \cdot t^*. \quad (4.37)$$

### 4.3.1. Barrera gaussiana

Como aplicación del coeficiente de transmisión desarrollado en el punto anterior, consideramos a continuación una barrera de potencial que varíe suavemente, como es el caso de una gaussiana, que se ilustra en la figura Fig. 4.10. Además podemos considerar que una gaussiana sería la versión *suavizada* mediante líneas curvas de una barrera de potencial cuadrada, y en ese sentido quizás se pueda interpretar como más parecida al caso real.

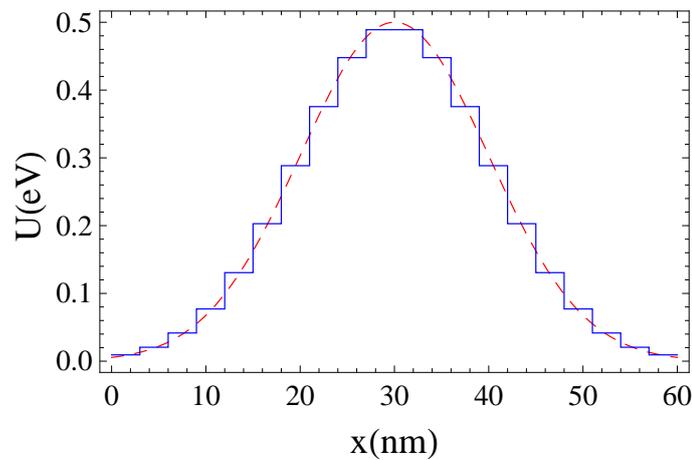


Figura 4.10: Barrera de potencial gaussiana (línea discontinua) cuyos parámetros son  $U_0 = 0.5$  eV,  $a = 10$  nm,  $x_0 = 30$  nm. Hemos aproximado la barrera de potencial por una escalera (línea continua) con 20 escalones, para representar de forma visual la aproximación realizada.

En particular, nuestra barrera de potencial gaussiana viene caracterizada por la expresión:

$$U(x) = U_0 \cdot \exp\left[-\frac{(x - x_0)^2}{2a^2}\right] \quad (4.38)$$

donde  $U_0$  es la altura máxima de la barrera de potencial,  $x_0$  es la abscisa en la cual está centrada, y  $a$  está relacionada con la anchura de la campana mediante la expresión  $\text{FWHM} = 2\sqrt{2 \ln 2} a$ , donde FWHM es la anchura total a la mitad del pico máximo. En nuestro ejemplo  $U_0 = 0.5$  eV,  $x_0 = 30$  nm y  $a = 10$  nm, además los portadores inciden sobre dicha barrera con un ángulo de  $10^\circ$ . Aproximamos la gaussiana por una escalera de 300 escalones, cuyo valor en cada escalón coincide con la semisuma en los extremos de dicho intervalo de la función gaussiana. A continuación representamos para la aproximación anterior el coeficiente de transmisión en la figura Fig. 4.11. En la cual observamos un mínimo amplio cuando la energía del portador incidente coincide

con el valor máximo de la barrera de potencial original  $U_0$ . Para valores de energía inferiores a  $U_0$ , tendrá un comportamiento oscilante asociado a las diferentes alturas de los tramos de barrera de potencial contiguos, mientras que para valores superiores a  $U_0$  no encontrará ningún obstáculo en la transmisión, y alcanzará su valor máximo  $T=1$ , manteniéndose indefinidamente en él.

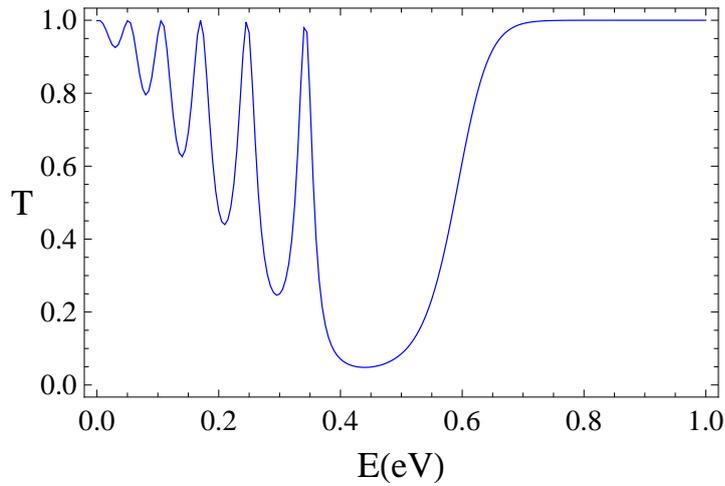


Figura 4.11: Coeficiente de transmisión frente a la energía del portador incidente para una barrera de potencial gaussiana caracterizada por la ecuación Eq[4.38], cuyos parámetros son  $U_0 = 0.5$  eV,  $a = 10$  nm,  $x_0 = 30$  nm y el ángulo de incidencia de los portadores es  $\phi=10^\circ$ . Hemos aproximado la barrera de potencial por una escalera con 300 peldaños. Observamos un mínimo amplio cuando  $E$  coincide con  $U_0$ . Para valores de energía inferiores a  $U_0$  tendrá un comportamiento oscilante asociado a las diferentes alturas de las barreras de potencial contiguas, mientras que para valores superiores a  $U_0$  no encontrará ningún obstáculo en la transmisión y tomará el valor máximo  $T=1$ .

## 4.4. Resumen y conclusiones

Después del estudio de dos barreras de potencial cuadradas aplicadas a una lámina de grafeno en un capítulo anterior, pretendemos seguir con el desarrollo ampliándolo a múltiples barreras de potencial. Éstas pueden realizarse experimentalmente mediante un dispositivo con múltiples puertas metálicas, mientras que la barrera de potencial escalonada puede utilizarse

para aproximar cualquier potencial que varíe suavemente.

Para múltiples barreras de potencial con la misma altura, un aumento en el número de barreras no afecta a la anchura del pseudogap que aparece en la representación del coeficiente de transmisión frente a la energía, sin embargo aparecen *resonancias muy selectivas en energía* en el interior del pseudogap, que quizás pudieran utilizarse en la realización de filtros muy selectivos.

En el caso de múltiples barreras de potencial de diferente altura, observamos que cuando el *ordenamiento* desde la izquierda y la derecha de las barreras coincide, es decir tenemos *simetría especular*, el resultado para el coeficiente de transmisión es el mismo. También que al representar el coeficiente de transmisión frente a la energía, aparece un mínimo asociado a cada barrera de potencial, el cual puede llegar a convertirse, dependiendo de los parámetros utilizados, en un pseudogap de energía. El pseudogap puede ajustarse mediante las siguientes variables: ángulo de incidencia, energía potencial de las barreras y número de barreras de potencial. Dependiendo de los parámetros utilizados, el extremo superior de un pseudogap puede alcanzar o superar el extremo inferior del siguiente pseudogap en energía, y así llegar a colapsar en un único pseudogap. Para poder llegar a *ajustar* independientemente el extremo inferior y el extremo superior en energía de un pseudogap, necesitaríamos al menos dos barreras de potencial diferentes. La posibilidad de crear zonas de transmisión y pseudogaps a partir de voltajes externos asociados a las barreras de potencial, ofrece la posibilidad de construir un *filtro* dependiente de la *energía*.

La barrera de potencial escalonada brinda la oportunidad de simular cualquier potencial que varíe suavemente mediante una aproximación por tramos escalonados. Hemos considerado interesante aplicarlo a una barrera gaussiana, ya que es una versión redondeada, y por tanto quizás más real de una barrera cuadrada. Para dicho caso, en el coeficiente de transmisión no aparecen mínimos asociados a cada barrera de potencial, aunque sí aparece claramente un *mínimo* en energía asociado al valor *máximo* del conjunto de las barreras de potencial. A partir de dicho valor de energía, la transmisión es máxima  $T=1$ .

# Capítulo 5

## Barreras de potencial bajo campo eléctrico

### 5.1. Introducción

Continuando con nuestro estudio de transmisión [71] y transporte de corriente [86] en dispositivos GFET, incorporamos ahora al modelo considerado en capítulos anteriores un nuevo elemento. Hasta ahora hemos considerado al dispositivo como no polarizado, con sus portadores en equilibrio electroquímico con los contactos a un potencial fijo único. Existe gran interés en el efecto que produce un campo eléctrico sobre el grafeno [94], de modo que, persiguiendo este objetivo, vamos a introducir ahora una polarización del GFET aplicando un potencial débil entre drenador y fuente, lo que introduce en la lámina de grafeno un campo eléctrico uniforme cuyo efecto sobre el transporte electrónico queremos considerar. Tratamos dicho campo por medio de un potencial adicional no constante, al que se encuentran sometidos los portadores de corriente, que varía linealmente con la posición entre fuente y drenador. Se sabe que las soluciones de la ecuación de Schrödinger para un potencial lineal pueden construirse en términos de las funciones de Airy. Esta aproximación se utiliza en [95] para caracterizar la unión P-N de un nanoribbon de grafeno. Sin embargo, en nuestro caso este tratamiento no resulta apropiado, dado que los electrones en el grafeno no vienen descritos por una ecuación de segundo orden, como es la de Schrödinger, sino por una ecuación de Dirac de primer orden cuyas soluciones son diferentes.

Las soluciones de la ecuación de Dirac en un potencial lineal han sido consideradas directamente [96,97] o por medio de una transformación canónica [98,99] que la convierte en una ecuación de Schrödinger con un potencial de oscilador armónico. El sistema ha sido resuelto para un potencial de diente

de sierra [100], emergente de una estructura con múltiples pozo/barrera sobre grafeno y para una barrera trapezoidal sobre grafeno [101], aproximando las zonas lineales por escalones. Soluciones analíticas exactas son muy escasas. Una deformación de esta barrera, que se convierte en triangular, sobre nanocintas de grafeno es estudiada en [102].

Para cumplir con nuestro objetivo, necesitamos discutir los diferentes modelos que caracterizan el transporte electrónico en un GFET polarizado, controlado por diversas puertas de potencial. El modelo más simple consiste en considerar la energía potencial de los portadores constante en las diferentes zonas del GFET, tanto en los contactos extremos, como en zonas intermedias o en las zonas donde aplicamos barreras de potencial constante mediante puertas [27, 103], es decir se aproxima el potencial lineal por diferentes barreras de potencial constante, que promedian de algún modo el perfil del potencial existente. Es posible también [104] aproximar el potencial lineal por una serie de tramos rectos consecutivos de valor constante, mediante un procedimiento análogo al que hemos utilizado para la barrera gaussiana. Un modelo intermedio consiste en considerar tramos de energía potencial constante en los extremos y que el campo eléctrico únicamente afecte a las zonas bajo la influencia de las barreras de potencial, como por ejemplo sucede para semiconductores tradicionales en [105].

En la figura Fig. 5.1 representamos nuestro modelo de GFET, con la lámina de grafeno encapsulada entre delgadas láminas de nitruro de boro hexagonal (h-BN), que es un extraordinario dieléctrico que mantiene al grafeno plano y aislado del entorno. Inicialmente Dean lo utilizó para que al depositar el grafeno sobre h-BN fuese plano. La rugosidad superficial del h-BN es del orden de  $1/3$  de la rugosidad del  $\text{SiO}_2$ , y aproximadamente toma el valor de  $0.33 \text{ nm}$  [106]. Los dispositivos de grafeno sobre h-BN presentan respecto a los dispositivos con sustrato  $\text{SiO}_2$  una mejor movilidad, una reducción en la inhomogeneidad de portadores, y una reducción en el dopado intrínseco. Posteriormente, también se puso h-BN sobre grafeno para aislarlo del exterior. El h-BN no afecta a los potenciales que pretendemos aplicar al grafeno.

Los portadores, cuya concentración en la lámina de grafeno se controla por la back gate, son impulsados por la diferencia entre los potenciales químicos de fuente y drenador  $\mu_S - \mu_D = eV_{DS}$  que es proporcional a la tensión de polarización del GFET y, por tanto, al campo eléctrico longitudinal existente en la lámina. Los portadores se encuentran a potenciales fijos  $V_S$  y  $V_D$  a la entrada y salida del dispositivo, y tienen que atravesar una barrera de potencial determinada por las puertas top gate y back gate, a lo largo

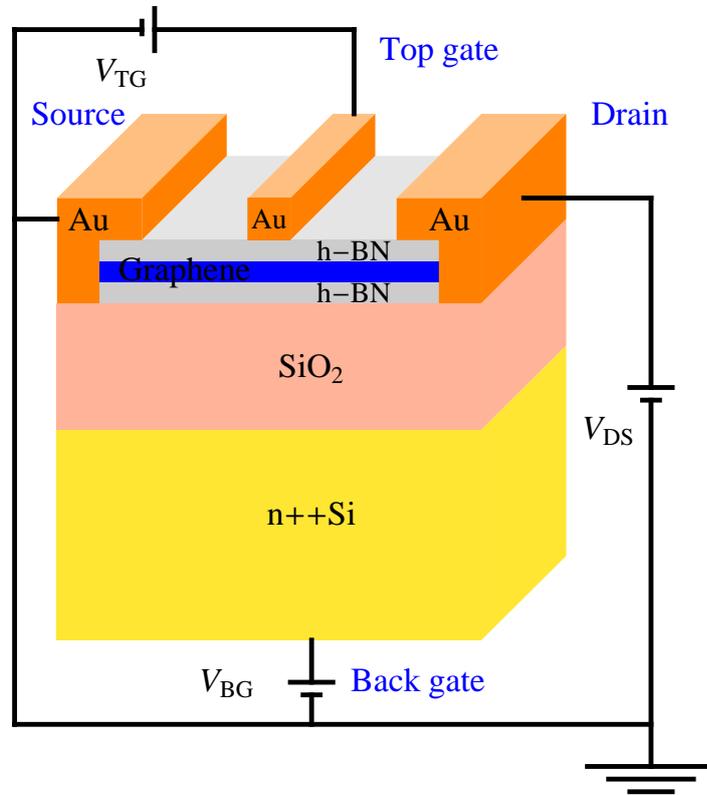


Figura 5.1: Modelo del GFET donde el grafeno se encuentra encapsulado entre capas de h-BN, lo cual le aporta que sea plano, no corrugado, y le aísla del exterior.

de cuya región de influencia el potencial eléctrico cae  $V_{DS}$ . Es el efecto de este campo eléctrico longitudinal sobre el coeficiente de transmisión de los portadores en el dispositivo lo que vamos a estudiar en este capítulo. Para ello comenzaremos considerando campos eléctricos débiles, y posteriormente consideraremos una aproximación a lo que podría suceder para campos eléctricos elevados.

## 5.2. Electrón bidimensional de Dirac en un potencial lineal

Buscamos la función de onda exacta para describir a un electrón bidimensional de Dirac sometido a un potencial que varía linealmente con su

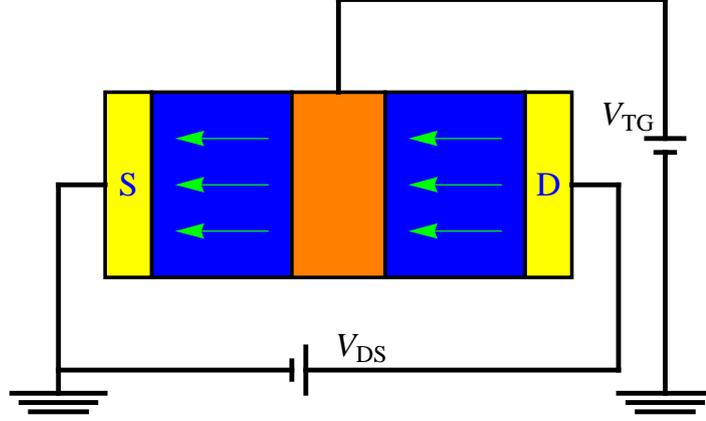


Figura 5.2: Vista superior del GFET, en la cual visualizamos el campo eléctrico mediante flechas verdes entre drenador (D) y surtidor (S). La lámina de grafeno (azul) está sometida a una barrera de potencial  $V_{TG}$  aplicada mediante una puerta superior (naranja).

posición. La energía potencial de dicho electrón se expresa como:

$$U(x) = -eV(x) = -e(V_1 + V_2 x) = W_1 - W_2 x \quad (5.1)$$

que deben ser solución del hamiltoniano:

$$H = v_F(\sigma_x P_x + \sigma_y P_y) + (W_1 - W_2 x)I_d \quad (5.2)$$

siendo  $\sigma_x$  y  $\sigma_y$  las correspondientes matrices de Dirac, e  $I_d$  la matriz identidad.

Cada uno de estos electrones del grafeno con energía  $E$  y pseudomomento próximo a los puntos de Dirac  $(k_x, k_y)$ , se describe mediante una función de onda espinorial de dos componentes

$$\begin{aligned} \Psi(x, y, t) &= e^{i(k_y y - \frac{E}{\hbar} t)} \begin{pmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \end{pmatrix} \\ &= e^{i(k_y y - \frac{E}{\hbar} t)} \begin{pmatrix} (k_y - i \frac{E-U(x)}{\hbar v_F})\varphi(x) + \varphi'(x) \\ (k_y + i \frac{E-U(x)}{\hbar v_F})\varphi(x) - \varphi'(x) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.3)$$

en la cual la función  $\varphi(x)$  debe ser solución de la ecuación diferencial de segundo orden:

$$\varphi''(x) + \left[ \left( \frac{E - U(x)}{\hbar v_F} \right)^2 - k_y^2 + i \frac{U'(x)}{\hbar v_F} \right] \varphi(x) = 0 \quad (5.4)$$

que al aplicarlo al potencial lineal que tenemos en la expresión Eq[5.1], obtenemos:

$$\varphi''(x) + \left[ \left( \frac{E - W_1 + W_2 x}{\hbar v_F} \right)^2 - \left( k_y^2 + i \frac{W_2}{\hbar v_F} \right) \right] \varphi(x) = 0 \quad (5.5)$$

Esta ecuación Eq[5.5] puede ser interpretada matemáticamente como la ecuación de Schrödinger para un potencial cuadrático de un oscilador [99]. Como novedad, nosotros aplicaremos esta interpretación para resolver el potencial lineal en nuestro dispositivo de grafeno. Obtenemos así nuestra solución exacta para el sistema de Dirac que estamos considerando, para lo cual introducimos

$$\varphi(x) = e^{i \int \frac{E - U(x)}{\hbar v_F} dx} F(\eta(x)) \quad (5.6)$$

donde la nueva coordenada  $\eta(x)$  es

$$\eta(x) = (-1)^{-1/4} \frac{E - W_1 + W_2 x}{\sqrt{\hbar v_F W_2}} \quad (5.7)$$

$F(\eta)$  se identifica como una solución de la ecuación diferencial de Hermite respecto a la variable  $\eta$ :

$$F''(\eta) - 2\eta F'(\eta) + 2i\lambda F(\eta) = 0 \quad (5.8)$$

con parámetro característico

$$\lambda = \frac{k_y^2 \hbar v_F}{2 W_2} \quad (5.9)$$

La solución general a esta ecuación puede construirse a partir de diversas funciones, hipergeométricas, de Hermite, de Weber, etc. que están todas relacionadas. Nosotros elegimos para construir la solución, la función de Hermite  $H[-i\lambda, \eta]$  y la función hipergeométrica  ${}_1F_1[i\frac{\lambda}{2}, \frac{1}{2}, \eta^2]$  como:

$$F(\eta) = C_1 H[-i\lambda, \eta] + C_2 {}_1F_1\left[i\frac{\lambda}{2}, \frac{1}{2}, \eta^2\right] \quad (5.10)$$

De este modo, el estado de los electrones del grafeno sometido a un potencial lineal puede expresarse como combinación lineal de dos pseudoespinores

$$\Psi(x, y, t) = C_1 \Psi_1(x, y, t) + C_2 \Psi_2(x, y, t) \quad (5.11)$$

siendo

$$\Psi_1(x, y, t) = A(x, y, t) \left( \frac{H[-i\lambda, \eta(x)] - \frac{(-1)^{1/4} \sqrt{\hbar v_F}}{\sqrt{W_2}} k_y H[-i\lambda - 1, \eta(x)]}{H[-i\lambda, \eta(x)] + \frac{(-1)^{1/4} \sqrt{\hbar v_F}}{\sqrt{W_2}} k_y H[-i\lambda - 1, \eta(x)]} \right) \quad (5.12)$$

$$\Psi_2(x, y, t) = A(x, y, t) \left( \frac{{}_1F_1 \left[ i\frac{\lambda}{2}, \frac{1}{2}, \eta(x)^2 \right] + \frac{(-1)^{1/4} \sqrt{\hbar v_F}}{\sqrt{W_2}} k_y \eta(x) {}_1F_1 \left[ 1 + i\frac{\lambda}{2}, \frac{3}{2}, \eta(x)^2 \right]}{{}_1F_1 \left[ i\frac{\lambda}{2}, \frac{1}{2}, \eta(x)^2 \right] - \frac{(-1)^{1/4} \sqrt{\hbar v_F}}{\sqrt{W_2}} k_y \eta(x) {}_1F_1 \left[ 1 + i\frac{\lambda}{2}, \frac{3}{2}, \eta(x)^2 \right]} \right) \quad (5.13)$$

y

$$A(x, y, t) = e^{i(k_y y - \frac{E}{\hbar} t + \frac{E - W_1}{\hbar v_F} x + \frac{W_2}{2\hbar v_F} x^2)}. \quad (5.14)$$

### 5.3. Una barrera de potencial sometida a campo eléctrico

El estudio del potencial lineal no basta para caracterizar un GFET polarizado. La presencia de la top gate obliga a añadir una barrera de potencial constante, que superpuesta a la energía eléctrica establecida por la tensión de polarización  $V_{DS}$ , proporcione la energía potencial total de los portadores de corriente al atravesar el GFET. Consideramos que la energía potencial entre los contactos extremos (surtidor y drenador) cae principalmente en la parte del grafeno que se encuentre *debajo* de la puerta metálica superior a la cual aplicamos una energía potencial constante  $U_1$ . Por tanto, los portadores en el grafeno conectado a cualquiera de los dos extremos, surtidor y drenador, tendrán aproximadamente la energía correspondiente a éstos  $U_S$  y  $U_D$  respectivamente. Este modelo se justifica a partir de mediciones experimentales que demuestran que el grafeno situado bajo una puerta metálica superior es más resistivo que el resto de grafeno que no está bajo la influencia de ninguna puerta superior.

Así, para construir la energía potencial que influye en los portadores, hemos de considerar tres tramos. Las zonas extremas están caracterizadas por una energía potencial constante  $U_S$  y  $U_D$ , asociadas respectivamente a los terminales de surtidor y drenador, y bajo la puerta, se ha de añadir una barrera de potencial de altura  $U_1$  y anchura de puerta  $l_{gate} = x_2 - x_1$ , a la energía potencial lineal asociada al campo eléctrico.

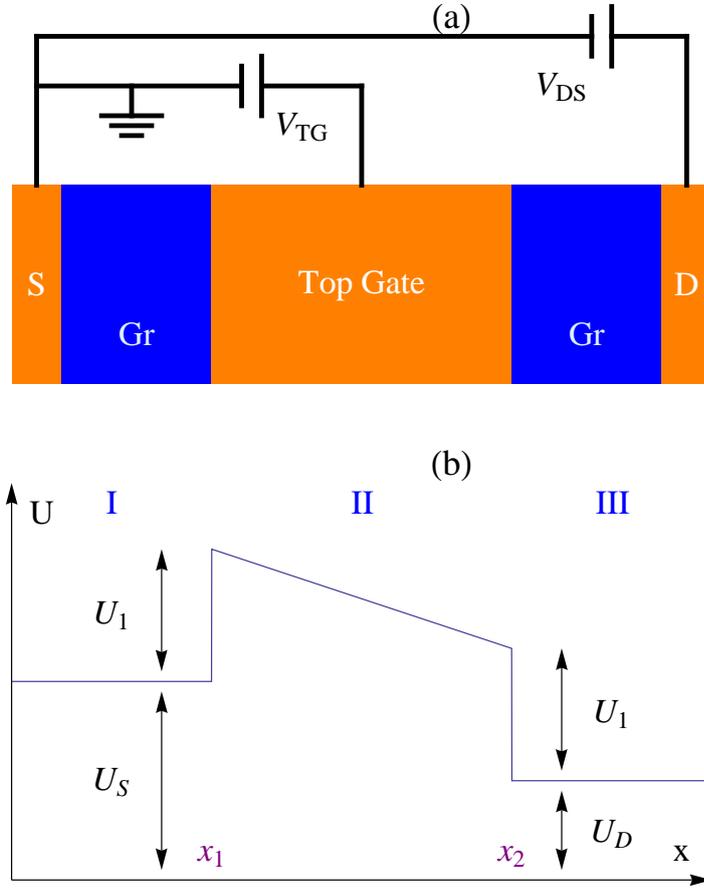


Figura 5.3: Vista superior del dispositivo (a). Energía potencial  $U$  frente a la distancia cuando aplicamos una barrera de potencial  $U_1$  dentro de un campo eléctrico asociado a la diferencia de potencial entre drenador y surtidor (b).

De este modo, la energía potencial a la cual está sometido el electrón, representada en la Fig. 5.3, se expresa como:

$$U(x) = \begin{cases} U_S & \text{si } x < x_1 \\ -F(x - x_1) + U_S + U_1 & \text{si } x_1 \leq x \leq x_2 \\ U_D & \text{si } x_2 < x \end{cases} \quad (5.15)$$

siendo  $F$  la fuerza asociada al campo eléctrico (en módulo) que aparece entre surtidor y drenador

$$F = \frac{U_S - U_D}{x_2 - x_1} = e \cdot \frac{V_S - V_D}{x_2 - x_1} \quad (5.16)$$

En cuanto a los casos extremos para el campo eléctrico (en módulo),

haremos la siguiente distinción:

$$F \cdot l_{gate} \ll U_1 \quad \rightarrow \quad \text{campo eléctrico muy débil} \quad (5.17)$$

$$F \cdot l_{gate} \gg U_1 \quad \rightarrow \quad \text{campo eléctrico muy elevado} \quad (5.18)$$

e inicialmente estudiaremos el campo eléctrico bajo, que además es el que tiene más sentido tanto desde el punto de vista teórico como experimental.

Los valores de pico en los extremos de la barrera de potencial, según la expresion Eq[5.15] son:

$$U_{peak1} = U(x_1) = U_S + U_1 \quad (5.19)$$

$$U_{peak2} = U(x_2) = U_D + U_1 \quad (5.20)$$

La resolución de la ecuación de Dirac para este sistema, requiere considerar estados distintos para el electrón en las 3 zonas, como en casos anteriores. Este nuevo potencial no cambia la simetría del hamiltoniano y siguen conservándose, como en capítulos anteriores, la energía  $E$  y el momento  $k_y$ . Llamamos  $\vec{k}_I = (k_x, k_y)$  al momento del electrón en la zona extrema I, y  $\vec{k}_{III} = (q_x, k_y)$  al momento del electrón en la zona extrema III. Ambos se encuentran relacionados a través de la energía, como observamos en las expresiones Eq[5.21-5.23]:

$$k_x = \frac{|E - U_S|}{\hbar v_F} \cos \phi \quad (5.21)$$

$$k_y = \frac{|E - U_S|}{\hbar v_F} \text{sen } \phi \quad (5.22)$$

$$q_x = \frac{1}{\hbar v_F} \sqrt{(E - U_D)^2 - (E - U_S)^2 \sin^2 \phi} \quad (5.23)$$

De acuerdo con estas consideraciones, podemos construir la solución a nuestro potencial como:

$$\begin{aligned} \Psi_I(x, y, t) &= \frac{e^{i(k_y y - \frac{E}{\hbar} t)}}{\sqrt{2LW}} \left\{ e^{ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ s_S \frac{k_+}{k} \end{pmatrix} + r e^{-ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ -s_S \frac{k_-}{k} \end{pmatrix} \right\} \\ \Psi_{II}(x, y, t) &= \frac{e^{i(k_y y - \frac{E}{\hbar} t + \frac{E - W_1}{\hbar v_F} x + \frac{W_2}{2\hbar v_F} x^2)}}{\sqrt{2LW}} \left\{ C_1 \begin{pmatrix} F_1[x] \\ F_2[x] \end{pmatrix} + C_2 \begin{pmatrix} F_3[x] \\ F_4[x] \end{pmatrix} \right\} \\ \Psi_{III}(x, y, t) &= \frac{e^{i(k_y y - \frac{E}{\hbar} t)}}{\sqrt{2LW}} t e^{iq_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ s_D \frac{q_+}{k} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.24)$$

siendo

$$\begin{aligned}
 F_1[x] &= H[-i\lambda, (-1)^{-1/4}z[x]] - \frac{(-1)^{1/4}\sqrt{\hbar v_F}}{\sqrt{W_2}}k_y H[-i\lambda - 1, (-1)^{-1/4}z[x]], \\
 F_2[x] &= H[-i\lambda, (-1)^{-1/4}z[x]] + \frac{(-1)^{1/4}\sqrt{\hbar v_F}}{\sqrt{W_2}}k_y H[-i\lambda - 1, (-1)^{-1/4}z[x]], \\
 F_3[x] &= {}_1F_1\left[i\frac{\lambda}{2}, \frac{1}{2}, -iz[x]^2\right] + \frac{\sqrt{\hbar v_F}}{\sqrt{W_2}}k_y z[x] {}_1F_1\left[1 + i\frac{\lambda}{2}, \frac{3}{2}, -iz[x]^2\right], \\
 F_4[x] &= {}_1F_1\left[i\frac{\lambda}{2}, \frac{1}{2}, -iz[x]^2\right] - \frac{\sqrt{\hbar v_F}}{\sqrt{W_2}}k_y z[x] {}_1F_1\left[1 + i\frac{\lambda}{2}, \frac{3}{2}, -iz[x]^2\right], \\
 z[x] &= \frac{E - U[x]}{\sqrt{\hbar v_F W_2}}, \quad \lambda = \frac{k_y^2 \hbar v_F}{2W_2}. \tag{5.25}
 \end{aligned}$$

Los parámetros auxiliares de las funciones anteriores son:

$$W_1 = F x_1 + U_1 + U_S, \quad W_2 = F = \frac{U_S - U_D}{x_2 - x_1}, \tag{5.26}$$

donde hemos denotado  $s_S = \text{sign}(E - U_S)$  y  $s_D = \text{sign}(E - U_D)$  en las zonas extremas. Además hemos considerado que las partículas se propagan inicialmente de izquierda a derecha, pudiendo reflejarse o transmitirse en el límite entre zonas, pero en la región III, únicamente quedan partículas propagándose hacia la derecha.

También ahora se debe verificar la condición de contorno de que la función de onda debe ser continua en la frontera entre zonas, por lo que debe cumplir la igualdad en los dos límites  $x = x_1$  y  $x = x_2$ ,

$$\Psi_I(x_1, y, t) = \Psi_{II}(x_1, y, t), \quad \Psi_{II}(x_2, y, t) = \Psi_{III}(x_2, y, t). \tag{5.27}$$

Este procedimiento estándar nos proporciona el sistema de ecuaciones a resolver. Cuatro ecuaciones con cuatro incógnitas que nos dan los coeficientes  $r, C_1, C_2$  y  $t$  que omitimos. Una vez obtenido el coeficiente  $t$  de la tercera zona, buscamos el coeficiente de transmisión  $T$ . Teniendo en cuenta que ahora, en presencia de un campo eléctrico, las regiones de energía potencial constante en las zonas extremas toman diferente valor de modo que debe construirse como  $T = s_S s_D \frac{q_x/q}{k_x/k} |t|^2$ . Así encontramos

$$T = \frac{N}{D}, \quad (5.28)$$

$$N = s_S s_D 16 k q k_x q_x \sinh \left[ \frac{\hbar v_F k_y^2 \pi}{W_2 4} \right], \quad (5.29)$$

$$D = Abs[(s_D q_+ F_1[x_2] - q F_2[x_2])(s_S k_- F_3[x_1] + k F_4[x_1]) - (s_S k_- F_1[x_1] + k F_2[x_1])(s_S q_+ F_3[x_2] - q F_4[x_2])]^2, \quad (5.30)$$

que, junto a las expresiones Eq[5.25] expresa el coeficiente de transmisión de los electrones (directo e inverso, pues ambos son iguales como se puede comprobar por cálculo directo) en términos de los parámetros que gobiernan el sistema  $E, U_S, U_D, U_1, x_1, x_2$  y  $\phi$ . Analizamos ahora gráficamente esta dependencia. Salvo que se indique lo contrario, el ángulo de incidencia de los portadores es de  $10^\circ$ :

- Dependencia del potencial fuente-drenador.

En la figura Fig. 5.4 representamos el coeficientes de transmisión frente a la energía para una barrera de potencial de 0.4 V y 100 nm para distintos valores del campo eléctrico : 0, 0.5, 1 y 2 mV/nm asociados a  $U_S = 0$  y  $U_D = 0, -50, -100, -200$  meV, respectivamente . Así, observamos el efecto sobre T del aumento del campo eléctrico asociado a un aumento en  $U_S - U_D$ . A campo eléctrico nulo observamos pendientes muy verticales en las paredes laterales con muchas y amplias oscilaciones en T. Un aumento del campo eléctrico aumenta la anchura del pseudogap energético, atenúa la caída del pseudogap de energía, y disminuye la amplitud de las oscilaciones.

- Dependencia de la anchura de la puerta superior.

En la figura Fig. 5.5 se representa el coeficiente de transmisión de una barrera de potencial de 0.4 V con  $U_S = 0$  meV y  $U_D = -50$  meV. Para anchuras de 100 nm (azul), 50 nm (verde) y 25 nm (rojo) se generan campos eléctricos de 0.5, 1 y 2 mV/nm. Observamos en dicha figura que cuánto más ancha es la barrera de potencial más profundo y definido es el mínimo, pero la anchura del pseudogap en energía básicamente se mantiene constante.

Además al comparar la gráficas Fig. 5.4 y Fig. 5.5, con los mismos valores de campo eléctrico, se observa que un aumento del campo debido a un aumento de la energía de polarización produce un aumento en la anchura del pseudogap energético y una disminución del número de

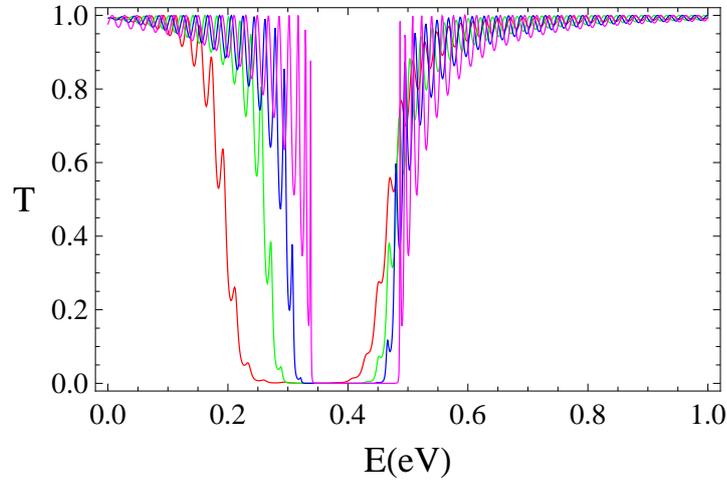


Figura 5.4: Coeficientes de transmisión para una barrera de potencial de 0.4 V y 100 nm de anchura dentro de un campo eléctrico nulo (lila), de 0.5 (azul), 1 (verde) y 2 (rojo) mV/nm. El aumento del campo eléctrico provoca un aumento en la anchura del pseudogap, así como pendientes laterales menos verticales y oscilaciones de menor amplitud.

oscilaciones en  $T$ , mientras que una disminución de la anchura de la barrera no modifica en la práctica la anchura del pseudogap y aumentan las oscilaciones.

- Dependencia del potencial de puerta superior.

En la figura Fig. 5.6 tenemos dentro de un campo eléctrico de 1 mV/nm una barrera de potencial de anchura 100 nm, y con distintas alturas 0.2 (rojo), 0.4 (verde) y 0.6 (azul) eV. Al representar el coeficiente de transmisión frente a la energía, observamos que a medida que aumenta la altura de la barrera de potencial aplicada, el pseudogap energético se va desplazando hacia energías superiores en torno a dichos valores, a la vez que se ensancha y define más, es decir con bordes más verticales. El desplazamiento y ensanchamiento del pseudogap para barreras de potencial cada vez mayores es semejante a lo que habíamos obtenido para una barra de potencial sin campo eléctrico aplicado.

- Dependencia del ángulo de incidencia de los portadores.

En la figura Fig. 5.7 tenemos dentro de un campo eléctrico de 1 mV/nm una barrera de potencial de 0.5 V y 100 nm, con distintos ángulos de incidencia del portador  $1^\circ$ ,  $5^\circ$  y  $10^\circ$ . A medida que aumenta el ángulo

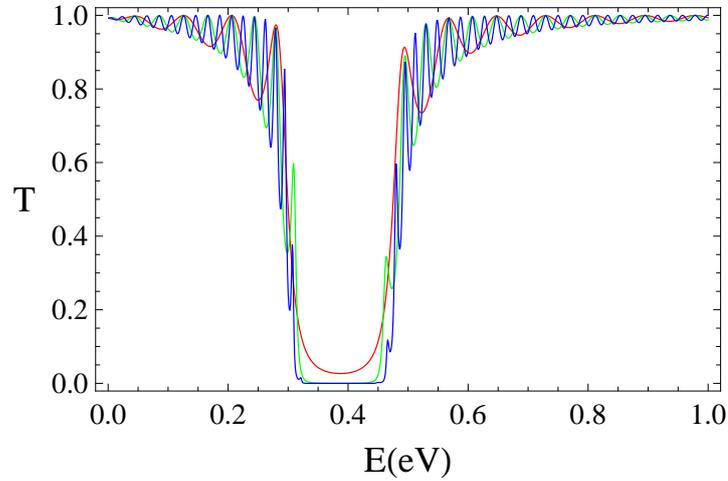


Figura 5.5: Coeficientes de transmisión para una barrera de potencial de 0.4 V, y anchuras 100 (rojo), 50 (verde) y 25 (azul) nm siendo  $U_S = 0.2$  eV y  $U_D = 0$  eV. Cuánto más ancha es la barrera de potencial más profundo y definido es el mínimo, pero la anchura del pseudogap se mantiene aproximadamente constante.

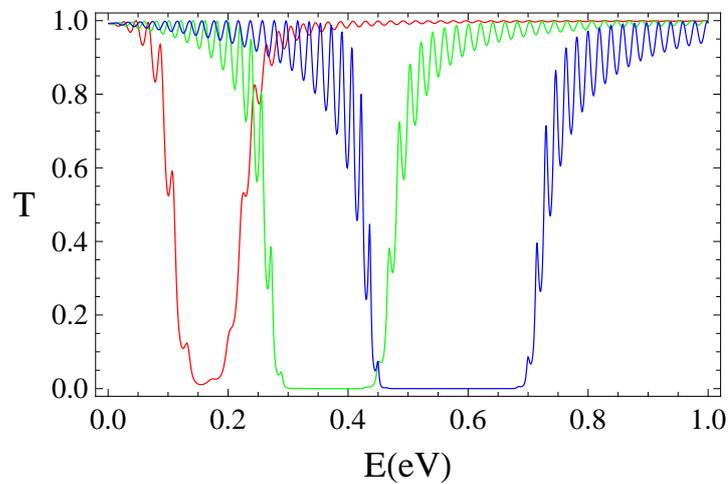


Figura 5.6: Coeficientes de transmisión para una barrera de potencial de 100 nm en un campo eléctrico de 1 mV/nm para barreras de potencial de alturas 0.2 (rojo), 0.4 (verde) y 0.6 (azul) eV. Al aumentar la altura de la barrera de potencial, el pseudogap se va desplazando hacia energías superiores, a la vez que se ensancha y se hace más vertical.

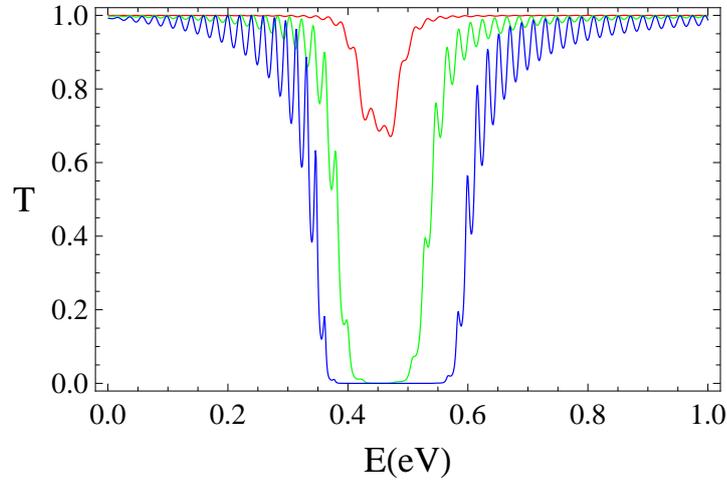


Figura 5.7: Coeficientes de transmisión para una barrera de potencial de 0.5 V y 100 nm dentro de un campo eléctrico de 1 mV/nm para ángulos de incidencia de los portadores  $\phi$  de  $1^\circ$  (rojo),  $5^\circ$  (verde) y  $10^\circ$  (azul). A medida que aumenta el ángulo de incidencia, los mínimos son cada vez más profundos y más anchos.

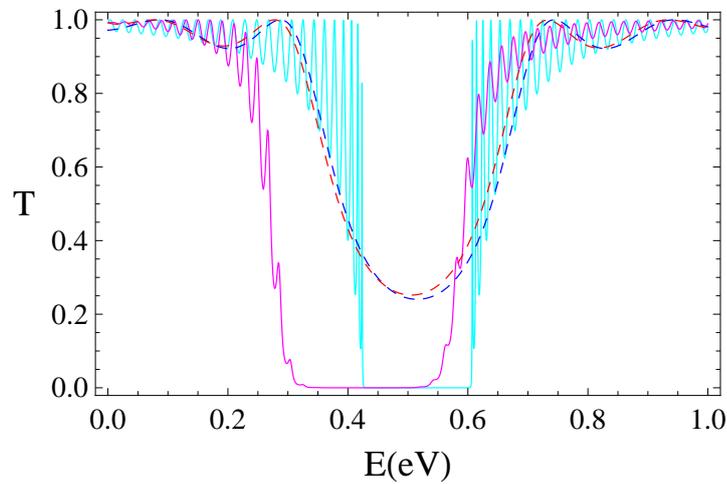


Figura 5.8: Coeficiente de transmisión para una barrera de potencial de 0.5 V, y anchura 10 nm con campo eléctrico de 2mV/nm (rojo discontinuo), sin campo eléctrico (azul discontinuo), y anchura 100 nm con campo eléctrico de 2 mV/nm (lila), sin campo eléctrico (añil).

de incidencia, los mínimos son cada vez más profundos y definidos, es decir se ensanchan. Sabemos que para incidencia perpendicular, es decir  $\phi = 0^\circ$  el coeficiente de transmisión debe ser 1, lo cual enlaza muy bien con la forma de la gráfica obtenida para  $\phi = 1^\circ$ .

Podemos interpretar de todo lo que se ha expuesto hasta ahora, que es la altura de la barrera el factor que más influye en el coeficiente de transmisión de una barrera de potencial sometida a campo eléctrico y éste tiene un papel menor. Si se compara el comportamiento de barreras con o sin campo eléctrico como en la Fig. 5.8, se obtiene que, a medida que aumenta la anchura, los resultados con campo y sin él se van diferenciando cada vez más. Es decir, el *campo eléctrico tendrá una mayor influencia cuánto mayor sea la anchura de la barrera de potencial.*

## 5.4. Dos barreras de potencial sometidas a campo eléctrico

Consideramos a continuación el caso de dos barreras de potencial  $U_1$  y  $U_2$  genéricas, en principio distintas tanto en altura como en anchura, sometidas a un campo eléctrico debido a la diferencia de potencial entre drenador y surtidor. Al añadir ahora una barrera de potencial con respecto al caso anterior, aparecen dos nuevas zonas. Caracterizamos la energía potencial en este caso por medio de:

$$U(x) = \begin{cases} U_S & \text{si } x < x_1 \\ -F(x - x_1) + U_S + U_1 & \text{si } x_1 \leq x \leq x_2 \\ U_{int} & \text{si } x_2 < x < x_3 \\ -F(x - x_4) + U_D + U_2 & \text{si } x_3 \leq x \leq x_4 \\ U_D & \text{si } x_4 < x \end{cases} \quad (5.31)$$

siendo  $F$  la fuerza asociada al campo eléctrico (en módulo) que se establece entre surtidor y drenador, y que *únicamente* se presenta en la zona de grafeno bajo las puertas superiores, que introducen sendas barreras de potencial de alturas  $U_1$  y  $U_2$ . En el modelo utilizado se considera que el campo eléctrico establecido por la polarización del GFET es el mismo bajo las dos puertas

$$F = \frac{U_S - U_D}{(x_2 - x_1) + (x_4 - x_3)} = e \cdot \frac{V_S - V_D}{(x_2 - x_1) + (x_4 - x_3)} \quad (5.32)$$

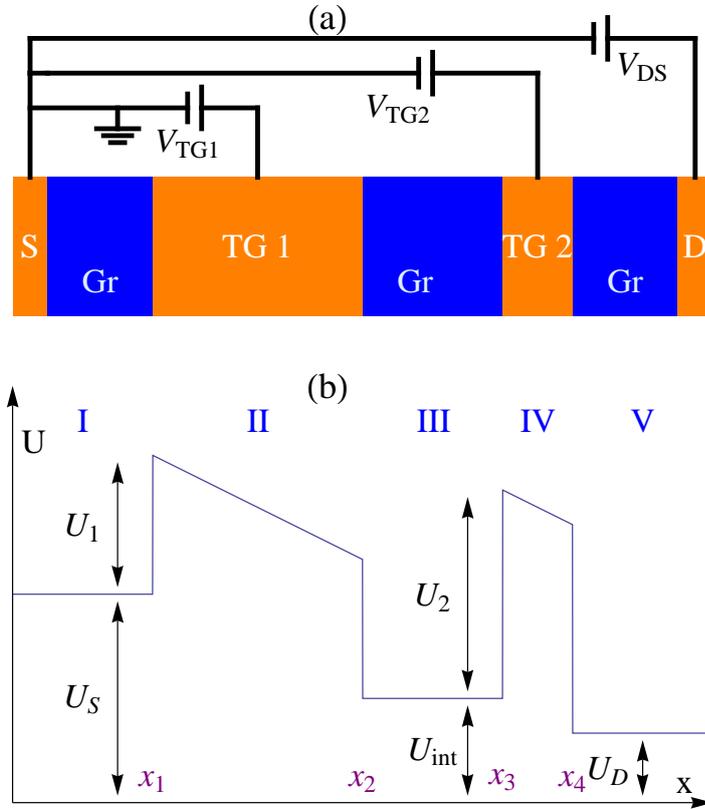


Figura 5.9: Vista superior del dispositivo (a). Energía potencial  $U$  frente a la distancia cuando tenemos dos barreras de potencial  $U_1$  y  $U_2$  sometidas a un campo eléctrico (b).

El valor de  $U_{int}$  asociado a la energía potencial constante que aparece en la zona intermedia entre las dos barreras, tal y como aparece representado en la figura Fig. 5.9, resulta:

$$U_{int} = \frac{U_S(x_4 - x_3) + U_D(x_2 - x_1)}{(x_2 - x_1) + (x_4 - x_3)} \quad (5.33)$$

de modo que siempre se cumple  $U_S > U_{int} > U_D$ .

De la figura Fig. 5.9 observamos que existen 3 zonas (las zonas extremas y la intermedia) en las cuales la energía potencial es constante, y otras 2 zonas (donde aplicamos las barreras de potencial) en las cuales la energía potencial varía linealmente con la misma pendiente en ambas, pero a diferentes alturas.

Las funciones de onda en cada zona son:

$$\begin{aligned}
 \Psi_I(x, y, t) &= \frac{e^{i(k_y y - \frac{E}{\hbar} t)}}{\sqrt{2LW}} \left\{ e^{ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ s_S \frac{k_+}{k} \end{pmatrix} + r e^{-ik_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ -s_S \frac{k_-}{k} \end{pmatrix} \right\}, \\
 \Psi_{II}(x, y, t) &= \frac{e^{i(k_y y - \frac{E}{\hbar} t + \frac{E-W_1}{\hbar v_F} x + \frac{W_2}{2\hbar v_F} x^2)}}{\sqrt{2LW}} \left\{ C_1 \begin{pmatrix} F_1[x] \\ F_2[x] \end{pmatrix} + C_2 \begin{pmatrix} F_3[x] \\ F_4[x] \end{pmatrix} \right\}, \\
 \Psi_{III}(x, y, t) &= \frac{e^{i(k_y y - \frac{E}{\hbar} t)}}{\sqrt{2LW}} \left\{ C_3 e^{i\kappa_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ s_{int} \frac{\kappa_+}{\kappa} \end{pmatrix} + C_4 e^{-i\kappa_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ -s_{int} \frac{\kappa_-}{\kappa} \end{pmatrix} \right\}, \\
 \Psi_{IV}(x, y, t) &= \frac{e^{i(k_y y - \frac{E}{\hbar} t + \frac{E-W_3}{\hbar v_F} x + \frac{W_2}{2\hbar v_F} x^2)}}{\sqrt{2LW}} \left\{ C_5 \begin{pmatrix} G_1[x] \\ G_2[x] \end{pmatrix} + C_6 \begin{pmatrix} G_3[x] \\ G_4[x] \end{pmatrix} \right\}, \\
 \Psi_V(x, y, t) &= \frac{e^{i(k_y y - \frac{E}{\hbar} t)}}{\sqrt{2LW}} t e^{iq_x x} \begin{pmatrix} 1 \\ s_D \frac{q_+}{q} \end{pmatrix}. \tag{5.34}
 \end{aligned}$$

Para definir las dos nuevas zonas hemos tenido que introducir las siguientes funciones adicionales a las que se introdujeron en las expresiones Eq[5.25]

$$\begin{aligned}
 G_1[x] &= H[-i\lambda, (-1)^{-1/4} y[x]] - \frac{(-1)^{1/4} \sqrt{\hbar v_F}}{\sqrt{W_2}} k_y H[-i\lambda - 1, (-1)^{-1/4} y[x]] \\
 G_2[x] &= H[-i\lambda, (-1)^{-1/4} y[x]] + \frac{(-1)^{1/4} \sqrt{\hbar v_F}}{\sqrt{W_2}} k_y H[-i\lambda - 1, (-1)^{-1/4} y[x]] \\
 G_3[x] &= {}_1F_1 \left[ i \frac{\lambda}{2}, \frac{1}{2}, -iy[x]^2 \right] + \frac{\sqrt{\hbar v_F}}{\sqrt{W_2}} k_y y[x] {}_1F_1 \left[ 1 + i \frac{\lambda}{2}, \frac{3}{2}, -iy[x]^2 \right] \\
 G_4[x] &= {}_1F_1 \left[ i \frac{\lambda}{2}, \frac{1}{2}, -iy[x]^2 \right] - \frac{\sqrt{\hbar v_F}}{\sqrt{W_2}} k_y y[x] {}_1F_1 \left[ 1 + i \frac{\lambda}{2}, \frac{3}{2}, -iy[x]^2 \right] \tag{5.35}
 \end{aligned}$$

siendo los parámetros

$$\kappa = \frac{|E - U_{int}|}{\hbar v_F}, \quad \kappa_x = \sqrt{\kappa^2 - k_y^2}, \tag{5.36}$$

$$y[x] = \frac{E - W_3 + W_2 x}{\sqrt{\hbar v_F W_2}}, \quad s_{int} = \text{sign}(E - U_{int}), \tag{5.37}$$

$$W_1 = F x_1 + U_1 + U_S, \quad W_3 = F x_4 + U_2 + U_D. \tag{5.38}$$

De nuevo igualamos las funciones de onda en las fronteras entre zonas contiguas para obtener el coeficiente  $t$  en la zona  $V$ .

$$\Psi_I(x_1, y, t) = \Psi_{II}(x_1, y, t), \quad \Psi_{II}(x_2, y, t) = \Psi_{III}(x_2, y, t), \tag{5.39}$$

$$\Psi_{III}(x_3, y, t) = \Psi_{IV}(x_3, y, t), \quad \Psi_{IV}(x_4, y, t) = \Psi_V(x_4, y, t). \tag{5.40}$$

Y volvemos a calcular el coeficiente de transmisión  $T = s_S s_D \frac{k q_x}{q k_x} Abs[t]^2$ , obteniéndose explícitamente

$$T = \frac{s_S s_D 256 k q \kappa^2 k_x q_x Abs[\kappa_x]^2 \sinh^2[\lambda \frac{\pi}{2}]}{Abs[e^{i\kappa_x(x_3-x_2)}(R_1 - R_2)(R_3 - R_4) - e^{-i\kappa_x(x_3-x_2)}(S_1 - S_2)(S_3 - S_4)]^2} \quad (5.41)$$

siendo  $y_l = y[x_l]$ ,  $z_l = z[x_l]$  y

$$\begin{aligned} R_1 &= (s_S k_- F_1[z_1] + k F_2[z_1])(s_{int} \kappa_- F_3[z_2] + \kappa F_4[z_2]), \\ R_2 &= (s_S k_- F_3[z_1] + k F_4[z_1])(s_{int} \kappa_- F_1[z_2] + \kappa F_2[z_2]), \\ R_3 &= (s_{int} \kappa_+ G_1[y_3] - \kappa G_2[y_3])(s_D q_+ G_3[y_4] - q G_4[y_4]), \\ R_4 &= (s_{int} \kappa_+ G_3[y_3] - \kappa G_4[y_3])(s_D q_+ G_1[y_4] - q G_2[y_4]), \\ S_1 &= (s_S k_- F_1[z_1] + k F_2[z_1])(s_{int} \kappa_+ F_3[z_2] - \kappa F_4[z_2]), \\ S_2 &= (s_S k_- F_3[z_1] + k F_4[z_1])(s_{int} \kappa_+ F_1[z_2] - \kappa F_2[z_2]), \\ S_3 &= (s_{int} \kappa_- G_1[y_3] + \kappa G_2[y_3])(s_D q_+ G_3[y_4] - q G_4[y_4]), \\ S_4 &= (s_{int} \kappa_- G_3[y_3] + \kappa G_4[y_3])(s_D q_+ G_1[y_4] - q G_2[y_4]). \end{aligned} \quad (5.42)$$

Aparecen en este sistema nuevos efectos, como son:

- Debido a la pérdida de simetría del sistema, la *energía potencial total* depende de la *posición relativa* entre sí, *que ocupen las barreras de potencial* (primera o segunda), lo cual está asociado al valor máximo de energía potencial que puedan alcanzar cada una de estas barreras de potencial  $U_{peak1}^{bar1}$  o bien  $U_{peak1}^{bar2}$ . Ya que para el pico más alto *peak1*, la barrera de potencial en primera posición se sumará con  $U_S$ , mientras que si aparece en segunda posición se sumará con  $U_{int}$ , teniendo en cuenta que el potencial en la zona intermedia  $U_{int}$  *siempre* es inferior al potencial en la parte izquierda  $U_S$ , ya que hemos tomado  $U_S > U_D$ .

$$\begin{aligned} U_{peak1}^{bar1} &= U(x_1) = U_S + U_1, \\ U_{peak2}^{bar1} &= U(x_2) = U_{int} + U_1, \\ U_{peak1}^{bar2} &= U(x_3) = U_{int} + U_2, \\ U_{peak2}^{bar1} &= U(x_4) = U_D + U_2. \end{aligned} \quad (5.43)$$

- La segunda barrera de potencial puede llegar a quedar *enmascarada*, es decir que su efecto puede llegar a no ser detectable. Eso sucederá cuando se verifique Eq[5.44]:

$$U_S \geq U_{int} + U_2 \quad (5.44)$$

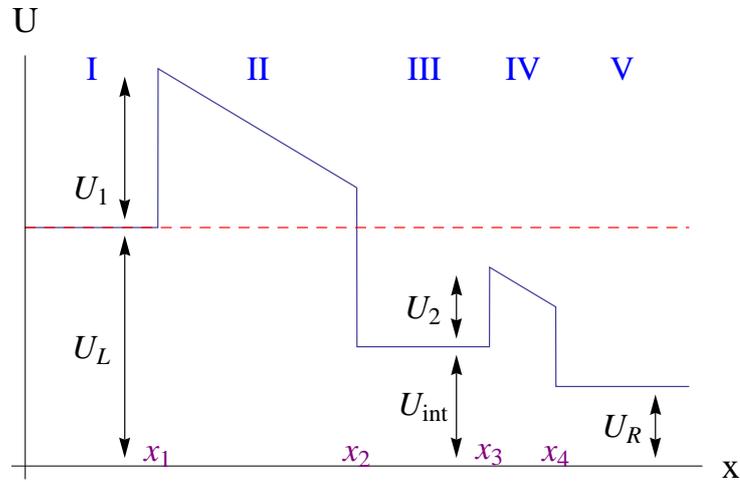


Figura 5.10: Representación de energía en dos barreras de potencial, cuando la segunda queda *enmascarada* al verificarse Eq[5.44].

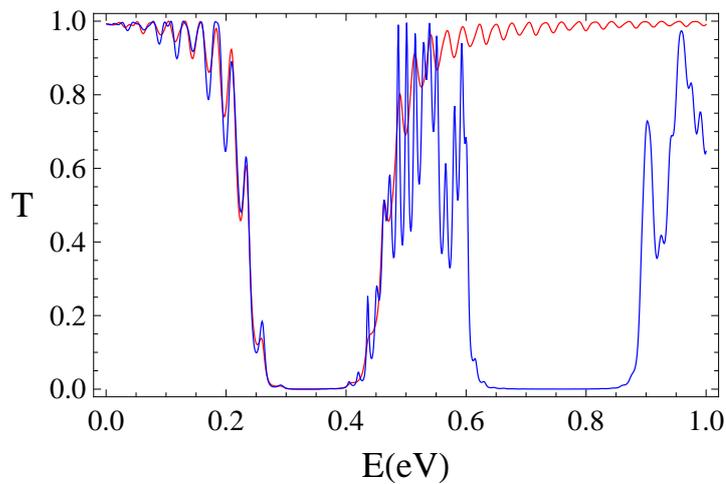


Figura 5.11: Coeficientes de transmisión para una barrera de potencial de 0.4 eV y 75 nm separada 50 nm de la segunda. La segunda tiene una altura de 0.1 eV (rojo) o 0.9 eV (azul) con 25 nm de anchura. Campo eléctrico 2 mV/nm y ángulo de incidencia  $10^\circ$ . Es patente el efecto de enmascaramiento en la gráfica roja al verificarse Eq[5.44].

En la figura Fig. 5.10 representamos el diagrama de energía para dos barreras de potencial, siendo el valor de  $U_2$  lo suficientemente pequeño como para que se verifique la expresión Eq[5.44], y por tanto esta se-

gunda barrera de potencial quede *enmascarada*. Este efecto se ilustra en la Fig. 5.11 donde se representa el coeficiente de transmisión frente a la energía del portador incidente para 2 barreras de potencial en un campo eléctrico de 2 mV/nm y ángulo de incidencia  $10^\circ$ . La primera barrera de potencial, de 0.4 eV y 75 nm, está separada 50 nm de la segunda, que tiene 25 nm de anchura, y una altura de 0.1 eV (rojo) o 0.9 eV (azul). Con estos parámetros tenemos que, para  $U_D = -0.2$  eV, es  $U_{int} = -0.15$  eV, y  $U_{int} + U_2 = -0.05$  eV en el primer caso y 0.75 eV en el segundo. Con estas condiciones, en el primer caso la segunda barrera está enmascarada. Debe esperarse que el coeficiente de transmisión presente un primer mínimo en ambos casos, tras lo cual, en el segundo caso (azul) vuelva a aparecer una segunda zona de extinción correspondiente a la segunda barrera que no existe en el primero. Este comportamiento es precisamente lo que aparece en la figura Fig. 5.11.

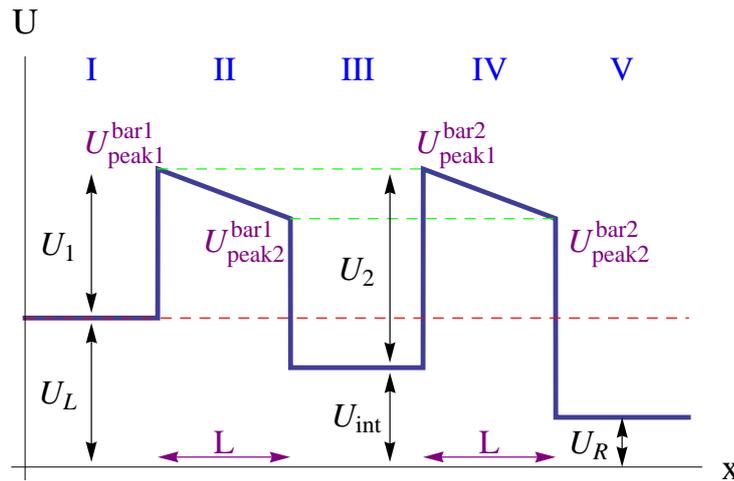


Figura 5.12: Dos barreras de potencial efectivo igual: alcanzan los mismos valores de pico  $U_{peak1}^{bar1} = U_{peak1}^{bar2}$  y  $U_{peak2}^{bar1} = U_{peak2}^{bar2}$  y son de la misma anchura  $L_1 = L_2 = L$ . Son idénticas por encima de  $U_S = 0$  eV.

- Efecto de la separación entre dos barreras de potencial sometidas a campo eléctrico.

Denomino barreras de potencial efectivo igual, a las que alcanzan los mismos valores de pico  $U_{peak1}^{bar1} = U_{peak1}^{bar2} = \dots = U_{peak1}^{bar_n}$  y  $U_{peak2}^{bar1} = U_{peak2}^{bar2} = \dots = U_{peak2}^{bar_n}$ , para diferentes alturas de las barreras de potencial  $U_1, U_2, \dots, U_n$ , estando sometidas al mismo campo eléctrico, y además tienen la misma anchura  $L_1 = L_2 = \dots = L_n = L$ . Éstas se comportan

como barreras idénticas por encima de  $U_L = 0$  eV, como representamos en la figura Fig. 5.12.

En la figura Fig. 5.13 representamos frente a la energía el coeficiente de transmisión de dos barreras con igualdad efectiva, siendo  $U_1 = 0.6$  eV y  $U_2 = 0.8$  eV dentro de un campo eléctrico de 4 meV/nm. (Puesto que  $U_S = 0$  eV y  $U_{int} = -0.2$  eV, ambas barreras de potencial alcanzan los mismos valores de pico). Ambas son de la misma anchura de 50 nm, separadas 1 nm (a) o 50 nm (b), y el ángulo de incidencia  $10^\circ$ . Obsevamos que únicamente existe *una zona* donde el coeficiente de transmisión frente a la energía del portador incidente es mínimo, y que el número de picos aumenta a medida que aumenta la distancia de separación entre las dos barreras de potencial.

- Para dos barreras de potencial con igualdad efectiva, existen valores particulares de los parámetros para los cuales aparecen múltiples resonancias claramente definidas en el pseudogap energético que presenta el coeficiente de transmisión, de forma similar a las resonancias que habíamos obtenido para dos barreras idénticas (sin campo eléctrico aplicado). Para visualizarlo, representamos en la figura Fig. 5.14 el coeficiente de transmisión para dos barreras de potencial que cumplen esta condición, siendo  $U_1 = 0.3$  eV y  $U_2 = 0.5$  eV, que debido al campo eléctrico dentro del cual están inmersas de 4 meV/nm, ambas alcanzan los mismos valores de pico en energía potencial  $U_{peak1}^{bar1} = U_{peak1}^{bar2} = 0.3$  eV y  $U_{peak2}^{bar1} = U_{peak2}^{bar2} = 0.1$  eV según la expresión Eq[5.43]. La anchuras de ambas es de 50 nm, y están separadas entre sí 1 nm, siendo el ángulo de incidencia  $10^\circ$ . Si consideramos la forma de la energía potencial frente a la distancia, por encima de 0 eV, ambas son completamente idénticas.

## 5.5. Campo eléctrico elevado

En la Sección 5.3, estudiamos la barrera de potencial sometida a un campo eléctrico débil, asociado a la diferencia de potencial entre drenador y surtidor. A continuación haremos lo propio para un campo eléctrico fuerte. Somos conscientes de que experimentalmente habría que tratarlo con sumo cuidado, debido a que hay un conjunto de fenómenos que no se han considerado, como el efecto de no-linealidad en la banda de dispersión para valores energéticos elevados, ni la posible ruptura del dieléctrico debido a un campo eléctrico elevado. Sin embargo, se continúa con el desarrollo teórico, por si acaso pudiese resultar de interés, al ser una aproximación a dicho caso.

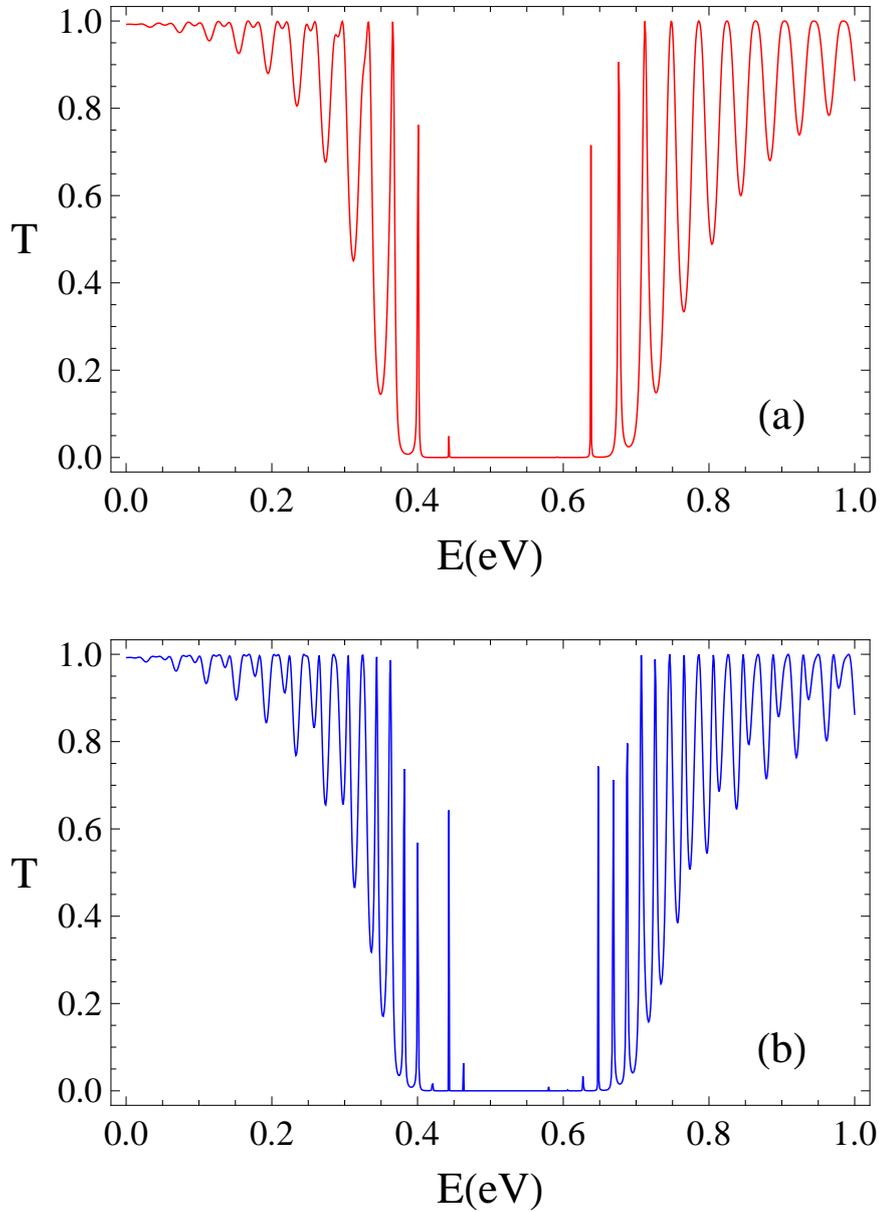


Figura 5.13: Coeficientes de transmisión para dos barreras de potencial efectivo igual, siendo  $U_1 = 0.6$  eV y  $U_2 = 0.8$  eV en un campo eléctrico de 4 meV/nm con 50 nm de anchura cada una y separadas 1 nm (a) o 50 nm (b) y ángulo de incidencia  $10^\circ$ . Al alcanzar los mismos valores de pico y tener la misma anchura, dan lugar a un único pseudogap. Al aumentar las distancia de separación entre las barreras de potencial aumenta el número de picos que aparecen.

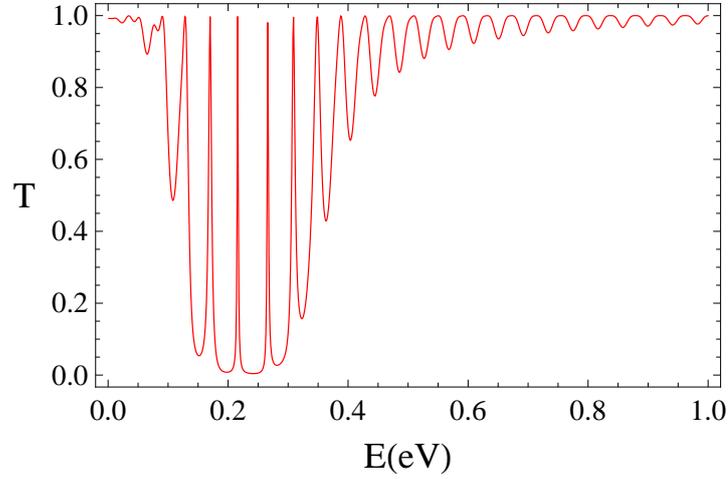


Figura 5.14: Coeficiente de transmisión para dos barreras de potencial efectivo igual, siendo  $U_1 = 0.3$  eV y  $U_2 = 0.5$  eV, en un campo eléctrico de 4 meV/nm. La anchura de cada una es 50 nm y separación 1 nm, siendo el ángulo de incidencia  $10^\circ$ . Aparecen múltiples resonancias en el pseudogap energético.

Cuando se verifique la condición Eq[5.45], nuestra barrera rectangular asimétrica, con la parte superior lineal, puede llegar a convertirse de manera *efectiva* en una barrera triangular [102], ya que únicamente tendrá sentido representar energías superiores a  $U_S$ . En la figura Fig. 5.15 representamos tres barreras de potencial  $U_1 > U_2 > U_3$  de tal forma que se verifica la condición Eq[5.45]. Cuanto menor sea la altura de la barrera de potencial, menor será la altura y anchura del *triangulo efectivo* de energía potencial

$$U_S \geq U_1 + U_D \quad (5.45)$$

Sin embargo, estas barreras triangulares suponen utilizar campos eléctricos extremadamente altos, por lo que tienen sentido teórico, pero como comentamos anteriormente poco sentido desde el punto de vista de una posible realización práctica.

En la figura Fig. 5.16 siendo  $\phi = 10^\circ$  representamos el coeficiente de transmisión para una barrera de potencial de 100 nm en un campo eléctrico de 4 mV/nm, para distintas alturas de la barrera de potencial que verifican la condición Eq[5.45]. Así, representaremos el caso límite 0.4 eV (lila). A medida que disminuimos la altura de la barrera 0.3 (azul), 0.2 (verde), 0.1 eV (rojo), observamos que el mínimo es cada vez menos profundo, como debe ser

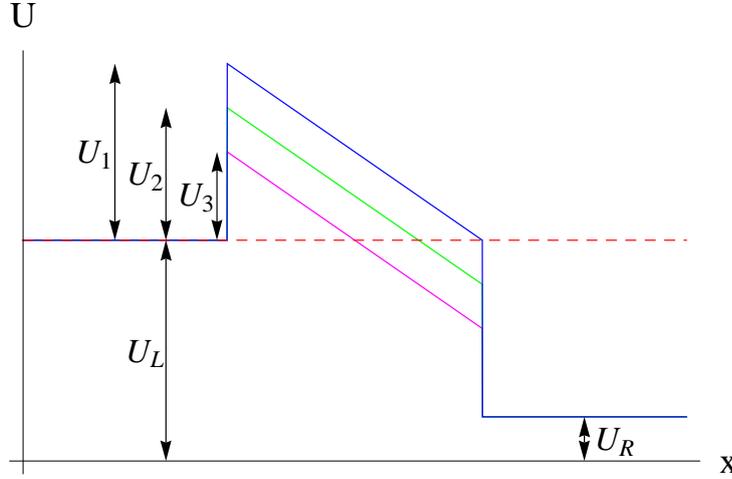


Figura 5.15: Distintas barreras de potencial  $U_1$ ,  $U_2$  y  $U_3$  aplicadas sobre el campo eléctrico asociado a  $U_S$  y  $U_D$ .

porque la barrera de potencial lineal por encima de  $U_S$  es cada vez de menor altura y de menor anchura *efectiva*. Se observa además, que la *envolvente de la pendiente descendente* es semejante en todas las gráficas con amplias oscilaciones, mientras que la pendiente ascendente comienza a distintos valores energéticos, relacionados con  $U_1$  y presenta oscilaciones mucho menores.

A continuación relacionamos nuestro potencial lineal Eq[5.15] con otro *aproximado* mediante tramos constantes Eq[5.46]:

$$U_{aprox}(x) = \begin{cases} U_S & \text{si } x < x_1 \\ U_{int} & \text{si } x_1 < x < x_2 \\ U_D & \text{si } x_2 < x \end{cases} \quad (5.46)$$

donde  $U_{int}$  tomará los siguientes valores posibles: el máximo  $U_{int}^{max} = U_S + U_1$ , el intermedio  $U_{int}^{med} = (U_S + U_D)/2 + U_1$ , y el mínimo  $U_{int}^{min} = U_D + U_1$ , para ver en qué medida los valores extremos y el intermedio se ajustan al caso de nuestro potencial lineal Eq[5.15].

En las figuras Fig. 5.17 representamos el coeficiente de transmisión en las expresiones Eq[5.28-5.30] para  $U_S = 0$  eV,  $U_D = -0.2$  eV, para un campo eléctrico de 20 mV/nm y una barrera de potencial  $U_1$  de 0.5 eV (lila), con una anchura de 10 nm (a) y 100 nm (b). Para utilizar la expresión aproximada Eq[5.46] tomaremos  $U_{int} = 0.5$  (rojo), 0.4 (verde) y 0.3 (azul) eV y el coeficiente de transmisión Eq[2.16]. En todos los casos el ángulo de incidencia es de  $10^\circ$ . Obsérvese que en la Fig. 5.17 (a) no se alcanza el mínimo de transmisión. Ello es debido a que la barrera es muy estrecha (10 nm). Se

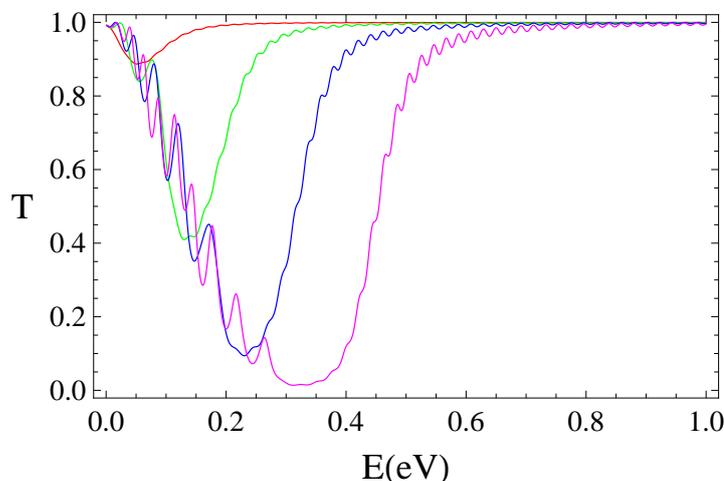


Figura 5.16: Coeficientes de transmisión para una barrera de potencial de 100 nm en un campo eléctrico de 4 mV/nm para distintas alturas de la barrera de potencial 0.1 (rojo), 0.2 (verde), 0.3 (azul), 0.4 (lila) eV. Siendo  $\phi = 10^\circ$ . La envolvente de la pendiente descendente es similar en todas las gráficas, mientras que la pendiente ascendente comienza en distintos valores energéticos asociados a  $U_1$ .

observa, no obstante, que de las tres aproximaciones realizadas siguiendo el desarrollo anterior, el caso aproximado superior 0.5 eV reproduce bastante bien los resultados obtenidos con el potencial lineal Eq[5.15], lo cual es lógico puesto que la anchura es muy pequeña. Para analizar el efecto de la anchura, se modifica únicamente ésta, que pasa de 10 nm a 100 nm, en la figura Fig. 5.17 (b). Ahora se observa que el caso intermedio superior no coincide con el caso lineal. Las gráficas para los potenciales aproximados tienen las paredes laterales muy verticales, frente al caso del potencial lineal en el cual aparecen pendientes finitas, con oscilaciones suaves. La *anchura* del pseudogap energético en el *caso del potencial lineal* es *superior* a cualquiera de los casos asociados a los potenciales aproximados. De hecho, salvando la pendiente finita, su valor mínimo en energía parece coincidir con el valor más bajo para  $U_{int}^{min}$ , y su valor máximo con el valor más alto para  $U_{int}^{max}$ . Es decir, los valores energéticos extremos del pseudogap en energía para el caso del potencial lineal coinciden básicamente (sin tener en cuenta la pendiente finita) con los casos aproximados mínimo y máximo en ambos extremos.

Cuando se verifiquen las condiciones Eq[5.47 - 5.48], nuestras barreras rectangulares asimétricas, con la parte superior lineal, pueden llegar a convertirse de manera *efectiva* en dos barreras triangulares, de forma semejante

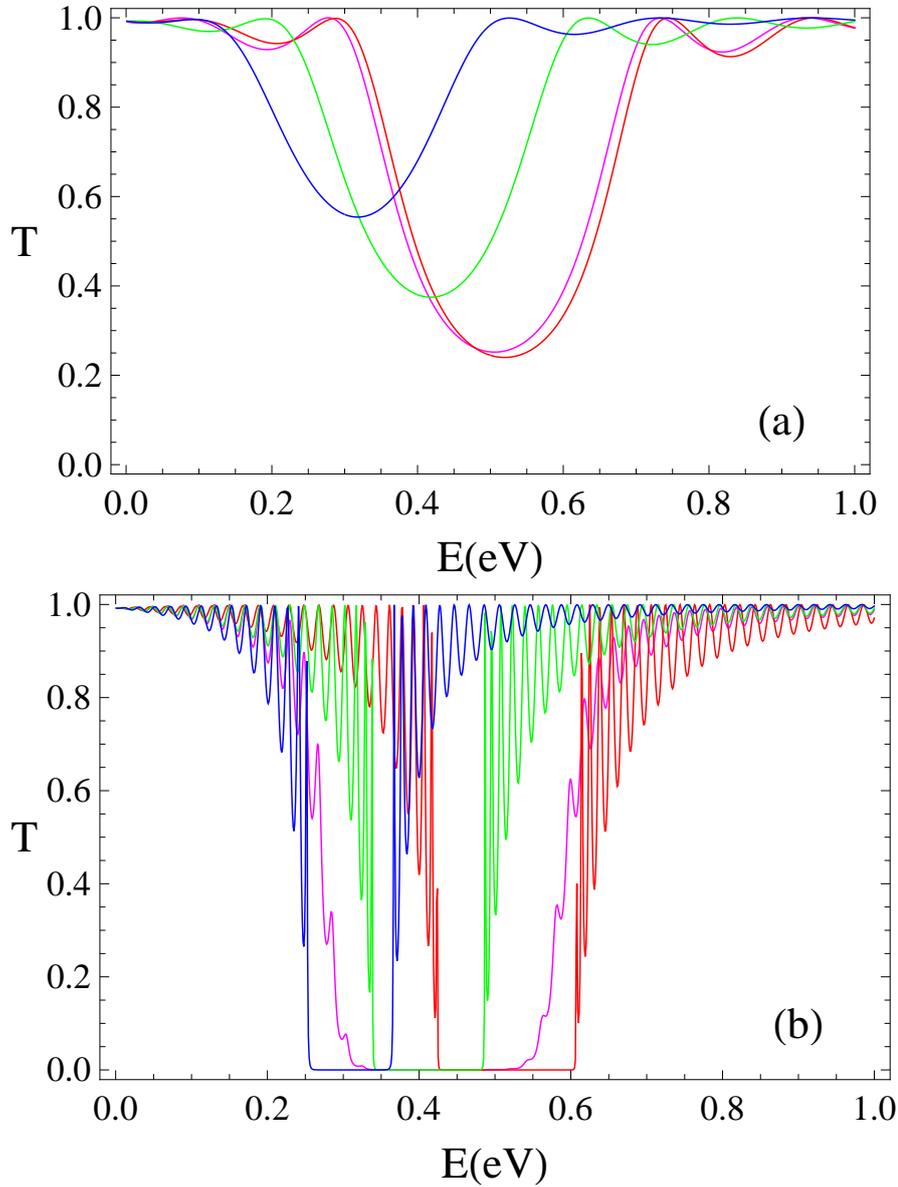


Figura 5.17: Coeficiente de transmisión para  $U_S = 0$  eV,  $U_D = -0.2$  V, con una anchura de 10 nm (a) o 100 nm (b), para un campo eléctrico de 20 mV/nm y una barrera de potencial  $U_1$  de 0.5 eV (lila). Casos aproximados  $U_{approx} = 0.5$  (rojo), 0.4 (verde), 0.3 (azul) eV. Ángulo de incidencia  $10^\circ$ .

a lo que sucedía para una barrera triangular en la figura Fig. 5.15. Puesto que únicamente tiene sentido en nuestro modelo representar energías superiores a  $U_S$ , para obtener barreras triangulares deberán verificarse las siguientes desigualdades:

$$U_1 + U_{int} \leq U_S \quad (5.47)$$

$$U_2 + U_D \leq U_S \quad (5.48)$$

En la figura Fig. 5.18 representamos en (a) la energía potencial para dos barreras de potencial de 0.2 eV la primera y 0.4 eV la segunda representado en verde, y de 0.1 eV la primera y 0.3 eV la segunda en azul. En ambos casos la anchura de la barrera es de 50 nm y están separadas 20 nm entre sí, en un campo eléctrico de 4 meV/nm. Así, para el primer caso (verde)  $U_{peak1}^{bar1} = U_{peak1}^{bar2} = 0.2$  eV,  $U_{peak2}^{bar1} = U_{peak2}^{bar2} = 0$  eV, mientras que para el segundo caso (azul)  $U_{peak1}^{bar1} = U_{peak1}^{bar2} = 0.1$  eV,  $U_{peak2}^{bar1} = U_{peak2}^{bar2} = -0.1$  eV. Con estos parámetros ambas barreras cumplen Eq[5.47 - 5.48] y se trata por tanto de dos barreras con potencial efectivo igual. En particular, en el segundo caso, el sistema inicial de barreras por encima de 0 eV es equivalente a un sistema efectivo formado por dos barreras triangulares idénticas de 0.1 eV de altura y 25 nm de anchura separadas 45 nm. En (b) representamos el coeficiente de transmisión para esa energía potencial frente a la energía del portador incidente con ángulo de incidencia  $10^\circ$ . El coeficiente de transmisión presenta gran número de oscilaciones que originan *resonancias*, lo cual no había sucedido con las oscilaciones que aparecían para una única barrera triangular Fig. 5.16. Al igual que entonces, los mínimos comienzan a caer con la misma envolvente de la pendiente descendente, y son las diferentes alturas en las barreras de potencial las que marcan el comienzo del ascenso en la envolvente de estas gráficas.

## 5.6. Resumen y conclusiones

Después del estudio de una, dos y varias barreras de potencial, el siguiente paso que hemos abordado es tratar de *mejorar y refinar nuestro modelo*. Para ello consideramos que sobre la lámina de grafeno no sólo influyen las barreras de potencial asociadas a las puertas superiores  $V_{TG}$ , sino también el campo eléctrico asociado a la diferencia de potencial entre surtidor y drenador  $V_{DS}$ , dando lugar a un *potencial efectivo lineal* en ciertas regiones del grafeno. Enlazando con la medición experimental, la caída de potencial tiene lugar en la zona del grafeno que se sitúa bajo las puertas superiores, donde es más resistivo el grafeno que en otras zonas donde no existen puertas de



potencial por encima de él. Lo anterior nos ha llevado a definir la energía potencial en esas zonas de la lámina de grafeno bajo la influencia de puertas superiores de potencial mediante funciones lineales. Para su resolución es necesario introducir en la definición de las funciones de onda en dichas zonas, tanto funciones de Hermite como funciones hipergeométricas. Lógicamente, en los terminales de drenador y surtidor tendremos una energía potencial constante, así como en las zonas del grafeno donde no estemos bajo la influencia de una puerta superior de potencial.

Distinguiremos entre campos eléctricos débiles cuando  $F \cdot l_{gate} \ll U_{top\ gate}$ , o bien campos eléctricos muy elevados cuando suceda lo contrario. Comenzaremos estudiando lo que sucede para campos eléctricos débiles, que son los más razonables para su estudio. El principal efecto del campo eléctrico es favorecer el transporte en la dirección de dicho campo aplicado. El *campo eléctrico* provoca la *pérdida de simetría* en cuanto a la energía potencial, para un sistema compuesto por una lámina de grafeno sometida a una o dos barreras de potencial. Esto se traduce en la aparición de pendientes finitas en las paredes laterales de los mínimos o pseudogaps energéticos, con suaves ondulaciones, frente al caso en el cual no existía campo eléctrico que daba lugar a pendientes verticales con fuertes ondulaciones, cuando representamos el coeficiente de transmisión frente a la energía.

Podemos actuar sobre el valor del campo eléctrico bien variando la energía potencial entre los contactos de fuente y drenador  $U_S - U_D$  o bien la anchura de la puerta superior. Aplicando uno u otro método obtendremos resultados diferentes al representar el coeficiente de transmisión frente a la energía del portador incidente. En el primer caso, al aumentar el campo eléctrico mediante el aumento de  $U_S - U_D$  se provoca un aumento en la anchura del pseudogap energético, mientras que en el segundo caso, el aumento del campo eléctrico mediante la disminución de la anchura de la puerta superior provoca que disminuya la pendiente del pseudogap, pero éste se mantiene básicamente constante.

Para dos barreras de potencial sometidas a campo eléctrico, el *orden que ocupan* las distintas barreras de potencial va a ser un factor importante, ya que influirá en el valor máximo que lleguen a alcanzar cada una de ellas. Sumaremos  $U_S$  a la que aparece en primer lugar y  $U_{int}$  a la que aparece en segundo lugar, siendo  $U_{int} < U_S$ , y sabiendo que  $U_{int}$  disminuye tanto más cuánto mayor sea el campo eléctrico y mayor sea la anchura de la primera barrera de potencial. Consecuencia de lo anterior es que la segunda barrera de potencial puede llegar a quedar *enmascarada*, es decir que sea indetectable.

Dos barreras de potencial sometidas a campo eléctrico con la misma energía potencial efectiva dan lugar únicamente a *una zona* donde el coeficiente de transmisión frente a la energía del portador incidente es mínimo. El aumento en la distancia de separación entre las dos barreras da lugar a un aumento en los picos que aparecen. Para ciertos parámetros particulares, dentro del pseudogap energético que obtenemos al representar el coeficiente de transmisión, aparecen claras resonancias.

En el límite de campo eléctrico elevado, las aproximaciones realizadas dejan de tener sentido, tanto por la relación de dispersión no-lineal a elevadas energías, como por la posible ruptura del dieléctrico utilizado. No obstante, continuaremos con el desarrollo, como una primera aproximación. Una barrera de potencial sometida a un campo eléctrico elevado, puede llegar a *degradarse* convirtiéndose de *manera efectiva* en una *barrera de potencial triangular*. En la representación del coeficiente de transmisión frente a la energía, para un mismo campo eléctrico y distintos valores de potencial aplicados a la top gate, observamos que la *envolvente de la pendiente descendente* es semejante en todos los casos, mientras que la pendiente ascendente comienza a distintos valores energéticos, relacionados con las diferentes alturas de las barreras de potencial. Para dos barreras con potenciales efectivos iguales, observamos algo semejante aunque ahora aparecen muchas *resonancias* dentro del mínimo que no existían para una única barrera triangular.



# Capítulo 6

## Constricciones en nanocintas de grafeno

### 6.1. Introducción

Este capítulo recoge el intento por nuestra parte de aplicar el formalismo de Dirac para obtener la conductancia en una constricción, inicialmente rectangular, realizada en una nanocinta de grafeno armchair. Para ello, a diferencia de capítulos anteriores, trataremos con nanocintas, las cuales posteriormente modificaremos para realizar un estrechamiento, y luego como extensión una constricción. En este proceso iremos viendo hasta qué punto es razonable la utilización de dicho formalismo.

Una nanocinta de grafeno (GNR) es una cinta de grafeno de anchura nanométrica ( típicamente inferior a 500 nm) y *constante*. La longitud de dicha cinta puede ser comparativamente mucho mayor que la anchura, por lo que se le puede considerar un sistema *quasiunidimensional* [7]. En la práctica, basta con que esta anchura sea inferior a la longitud de scattering de los electrones del grafeno. Esta pequeña anchura en la cinta da lugar a efectos de *confinamiento cuántico*, ya que los electrones básicamente se propagan a lo largo de la cinta, mientras que oscilan como en una onda estacionaria en la dirección de confinamiento (transversal). Esto difiere bastante del movimiento de los electrones en una lámina de grafeno ilimitada, donde los fenómenos estacionarios no se manifiestan.

La forma de los bordes de la nanocinta, principalmente zig-zag (ZGNR) o armchair (AGNR), [7, 14, 107–110], interviene de modo determinante en las propiedades de la cinta. La *estructura electrónica* de las nanocintas de

grafeno es muy sensible a la *geometría de los bordes* y a la *anchura* de la cinta [111]. La anchura finita de las nanocintas rompe el espectro energético en un *conjunto infinito de bandas* [109,112], en vez de una *única banda* como sucedía en el caso de una lámina de grafeno. Una cinta ZGNR es siempre metálica. Sin embargo, una cinta AGNR dependiendo de su anchura puede tener un comportamiento metálico o semiconductor [14]. Las cintas con bordes zigzag tienen *estados de borde* (funciones de onda) localizados en el nivel de Fermi, mientras que esto no sucede en cintas con bordes armchair [113]. Los estados de borde son muy importantes cuando la anchura de la cinta es nanométrica. En las cintas semiconductoras, la energía del gap  $E_g$  es inversamente proporcional a la anchura de dichas cintas [107,110], lo cual provoca que para anchuras superiores a 100 nm,  $E_g$  tienda a cero, y la estructura de bandas tendería a ser la misma que existe en una lámina de grafeno [7]. En la actualidad se conocen técnicas precisas para controlar la anchura de una cinta [108,112,114,115] y las características de sus bordes [116–118], hasta el punto que es posible fabricar a gran escala cintas tan estrechas como 10 nm [119] con una muy buena movilidad de los portadores de carga, donde se hace necesario considerar los efectos de borde.

Los antecedentes sobre el estudio de las constricciones en las cintas de grafeno, son las constricciones para gases bidimensionales [120] que se habían estudiado años atrás. En 1988 tuvo lugar el descubrimiento de *cuantización en la conductancia* por van Wees [121], y Wharam [122,123] asociada a la *constricción de un gas de electrones bidimensional* por punto de contacto, que consiste en una constricción corta y estrecha entre dos regiones eléctricamente conductoras de mucha mayor anchura. La constricción tiene una anchura del orden de la longitud de onda de Fermi, y es mucho menor que la longitud de camino libre medio de los portadores de carga [124]. La conductancia de los puntos de contacto cuántico está cuantizada en unidades de  $2e^2/h$ . La transición entre las regiones ancha y estrecha en una constricción puede ser gradual (adiabática) [125] o abrupta [2,126].

Las constricciones sobre nanocintas de grafeno (GNC) han sido estudiadas teóricamente por Muñoz-Rojas [127], Darancet [128] y Yin [129], mediante la teoría de enlace fuerte (tight-binding), y también usando su semejanza con una guía de onda de grafeno formada conectando múltiples segmentos de AGNR de diferentes anchuras [130,131]. Los estudios teóricos sobre constricciones dieron paso a su construcción física y al desarrollo de experimentos tendentes a clarificar su comportamiento [132–138]. Experimentalmente se han llegado a obtener constricciones con un canal muy estrecho [139] y, en este proceso de reducción progresiva, se ha llegado incluso hasta tamaños de

sencillas cadenas de átomos de carbono [140, 141].

Nos proponemos analizar en esta sección estos fenómenos, centrándonos en las nanocintas con terminación en armchair, que, debido a su versatilidad, parecen las más adecuadas en el diseño de dispositivos electrónicos [142]. El estudio teórico de las nanocintas se ha hecho tradicionalmente mediante métodos de tight-binding [107] o mediante la teoría de densidad funcional [108], mientras que trabajos analíticos basados en el formalismo de Dirac como el nuestro son más bien escasos.

## 6.2. Estados electrónicos en una nanocinta de grafeno

Para la obtención de los estados electrónicos, seguimos la metodología utilizada por Castro Neto [14], Brey [109] y Wurm [143]. Ahora se ha de tener en cuenta la existencia de confinamiento en una dirección (orientamos la cinta de modo que la dirección de confinamiento sea el eje  $x$ ), y hemos de considerar la ecuación efectiva de Dirac incluyendo la contribución de los dos valles. El estado electrónico en la cinta correspondiente a una energía  $E$  debe escribirse como

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} \begin{pmatrix} \Phi_A(\mathbf{r}) \\ \Phi_B(\mathbf{r}) \end{pmatrix} + e^{-i\frac{E}{\hbar}t} e^{i\mathbf{K}'\mathbf{r}} \begin{pmatrix} \Phi'_A(\mathbf{r}) \\ \Phi'_B(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (6.1)$$

siendo

$$\Phi(\mathbf{r}) = [\Phi_A(\mathbf{r}), \Phi_B(\mathbf{r}), \Phi'_A(\mathbf{r}), \Phi'_B(\mathbf{r})]^\dagger \quad (6.2)$$

Aplicamos la ecuación de Dirac a una nanocinta armchair de grafeno infinita en la dirección  $y$ , y de anchura finita  $W$  en la dirección  $x$ . Puesto que los bordes de la cinta que consideramos es armchair, contienen átomos de los dos tipos: A y B. Así, se debe exigir que se anulen a la vez en los dos extremos tanto la contribución a la función de onda de la subred A como de la subred B. Es decir

$$\Psi(0) = \Psi(W) = 0 \quad (6.3)$$

La anchura efectiva considera la primera línea de posiciones atómicas vacías en los bordes de la cinta, normalmente ocupada por átomos de hidrógeno, es decir  $W_{eff} = W + a$  [130, 143], aunque la denotaremos de aquí en adelante como  $W$ . En la Fig. 6.1 representamos una cinta AGNR cuya dirección longitudinal de transmisión es el eje  $y$ , con una anchura *efectiva* finita  $W$ . Los

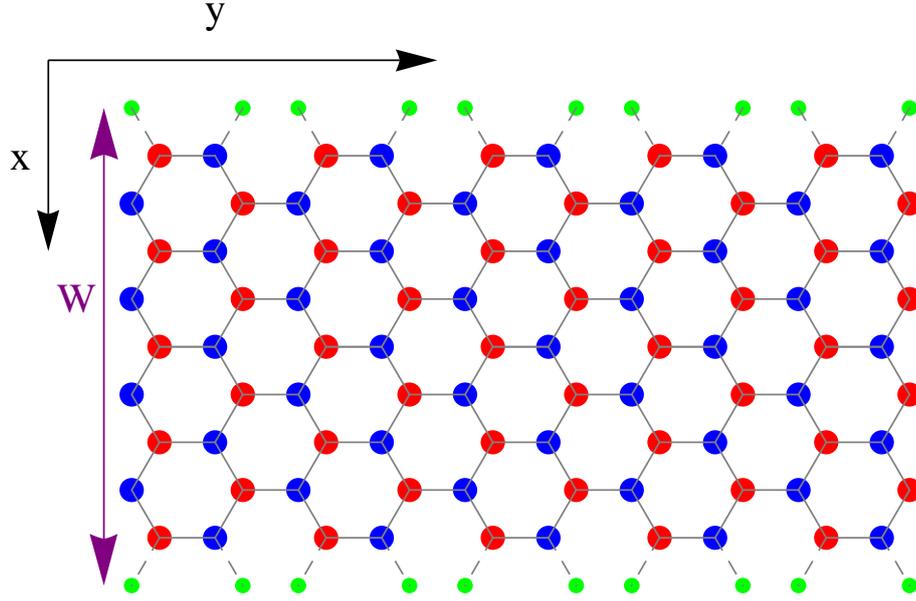


Figura 6.1: AGNR donde representamos átomos de la subred A (círculos rojos), átomos de la subred B (círculos azules) y átomos de hidrógeno (círculos verdes).  $W$  es la anchura efectiva de la cinta, y suponemos longitud infinita a lo largo del eje  $y$ .

bordes de la cinta están constituidos por átomos de hidrógeno representados por círculos verdes, siendo los círculos rojos y azules, átomos de la subred A y B, respectivamente.

La función de onda electrónica queda reducida a:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{LW}} \sin\left[\frac{n\pi}{W}x\right] \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon}{\varepsilon}(q_n - ik_y) \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6.4)$$

donde la componente  $x$  del momento en el cristal  $k_x = q_n$ , se encuentra cuantizada, con

$$q_n = \frac{n\pi}{W} - K, \quad K = \frac{4\pi}{3a}, \quad (6.5)$$

siendo  $K$  la componente  $x$  del vector de onda en el punto de Dirac  $\mathbf{K}$ . Existen ciertas anchuras de la cinta para las cuales existe una banda  $n$  cuyo vector de onda cuantizado  $q_n$  es nulo. El espectro de energía para esa banda  $n$  no presenta gap, y por tanto el comportamiento de la cinta es metálico. En cualquier otro caso será semiconductor.

Para una cinta dada de anchura (efectiva)  $W$ , y a una energía dada  $\epsilon = E/\hbar v_F$ , el número de estados propagantes viene determinado por la condición  $\epsilon > |q_n|$ , es decir, cuando

$$\frac{W}{\pi}(K - \epsilon) < n < \frac{W}{\pi}(K + \epsilon) \quad (6.6)$$

- Para una energía  $\epsilon$  dada, el número del modo más bajo posible en la representación de  $E$  frente a  $k_y$  que contribuye a la conducción no es  $n = 0$ , sino  $n_{inf} = \text{Int}[W(K - \epsilon)/\pi] + 1$ , siendo  $\text{Int}[A]$  la parte entera de  $A$ , y el número del modo más alto de conducción es  $n_{sup} = \text{Int}[W(K + \epsilon)/\pi]$ .
- El número de modos propagantes  $N$ , que aumenta con la anchura de la cinta  $W$  y con la energía  $\epsilon$  es:

$$N = \text{Int}\left[\frac{W}{\pi}(K + \epsilon)\right] - \text{Int}\left[\frac{W}{\pi}(K - \epsilon)\right]. \quad (6.7)$$

- La separación entre dos modos consecutivos (Eq[6.5]) es inversamente proporcional a la anchura de la cinta

$$q_{n+1} - q_n = \frac{\pi}{W}. \quad (6.8)$$

Así, a medida que aumenta la anchura de una cinta, aumenta el número de modos que contribuyen a la conducción, a la vez que disminuye la separación entre dichos modos. En la figura Fig. 6.2 representamos el número de modos frente a la energía de los portadores para cintas AGNR de anchuras  $W = 13 \cdot a$  (rojo) y  $26 \cdot a$  (azul). Ambas son semiconductoras, puesto que para energías próximas a 0 eV no existe ningún modo propagante. Para valores de energía no muy pequeños, el número de modos conductores de la cinta ancha es mayor que en la cinta estrecha. Además el intervalo de energías entre la aparición de dos modos sucesivos es menor en la cinta ancha que en la estrecha.

En la figura Fig. 6.3 (a) se representa la energía frente a  $k_y$  para una cinta AGNR de anchura  $W = 13 \cdot a$ . Los modos que contribuyen a la conducción para valores de energía hasta 1000 meV son  $n = 16$  (rojo), 17 (verde) y 18 (azul). Observamos que *no aparecen de manera correlativa*, es decir a medida que aumenta  $n$  no aumenta el valor mínimo de la energía a la cual aparece dicho modo. En la figura (b) hacemos lo mismo para una cinta AGNR de anchura  $W = 26 \cdot a$ . Al ser la cinta de mayor anchura, existen ahora más modos

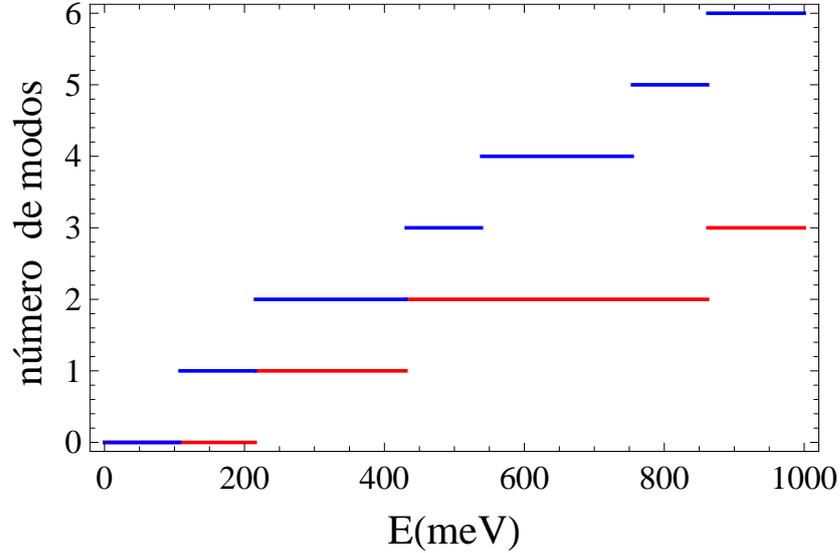


Figura 6.2: Representación del número de modos propagantes frente a la energía para AGNR de anchuras  $W = 13 \cdot a$  (rojo) y  $26 \cdot a$  (azul). Para energías no demasiado bajas, en una cinta ancha aparecen más modos que en una cinta estrecha.

que en el caso anterior. Los modos conductores de menor energía son  $n = 32$  (rojo), 33 (verde), 34 (azul), 35 (rojo discontinuo), 36 (verde discontinuo) y 37 (azul discontinuo). Se observa claramente que a medida que aumenta el número  $n$  asociado al modo (dentro de los que contribuyen), los valores de energía (para  $k_y = 0$ ) asociados a dichos modos comienzan a disminuir, hasta aproximarnos al origen de energías. A continuación, y siguiendo con el aumento de  $n$ , hacen lo contrario; es decir empiezan a aumentar, alejándose así del origen.

### 6.3. Estrechamiento en una nanocinta

Realizamos un estrechamiento conectando dos nanocintas AGNR de diferente anchura. En la zona I tenemos una AGNR *ancha*, de anchura efectiva  $W_1$ , y en la zona II una AGNR *estrecha*, de anchura efectiva  $W_2$  como en la figura Fig. 6.4. Ambas son idealmente de longitud semiinfinita a lo largo del eje  $y$ , y la interface tiene lugar en  $y = 0$ . Aunque en sentido estricto hay una muy pequeña separación de  $a_0/2$  entre la columna con átomos de la subred A y la columna con átomos de la subred B, el efecto de este desplazamiento de red para cintas no demasiado estrechas es despreciable. En cualquier ca-

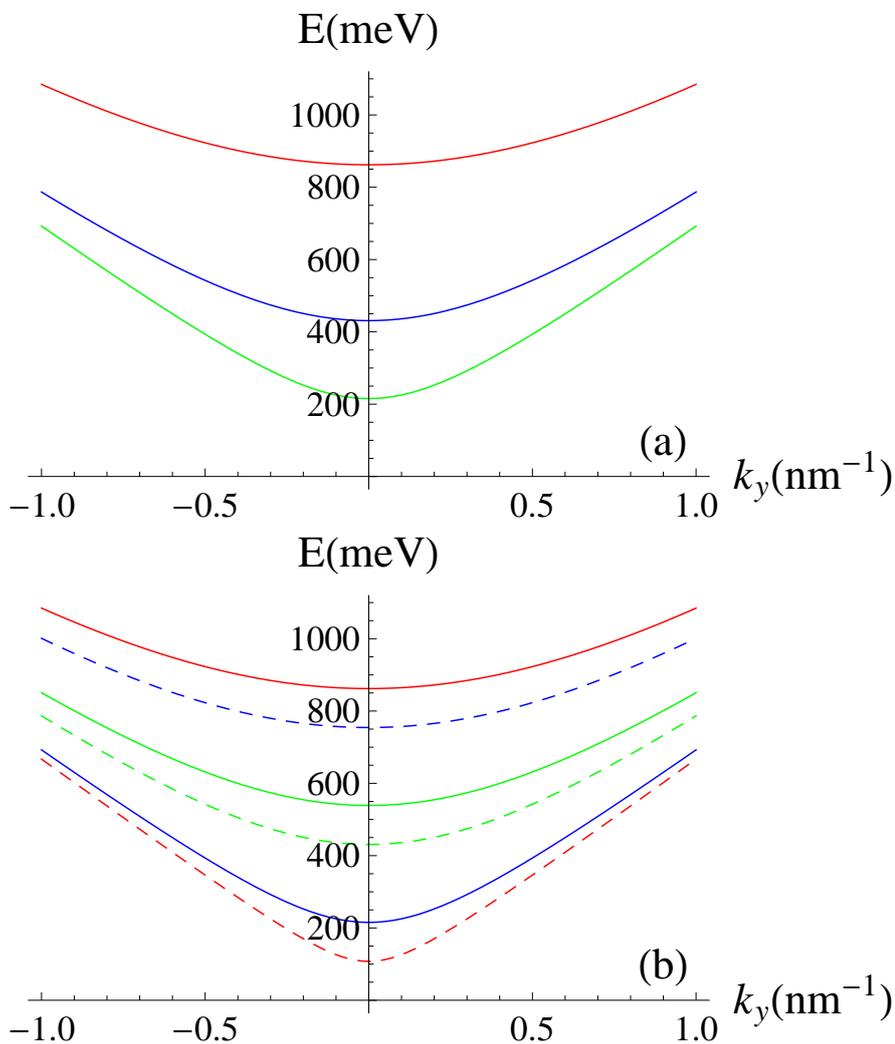


Figura 6.3: Representación de la energía frente a  $k_y$  para los modos propagantes de una AGNR en (a) con  $W = 13 \cdot a$  para  $n = 16$  (rojo), 17 (verde) y 18 (azul), y en (b) con  $W = 26 \cdot a$  para  $n = 32$  (rojo), 33 (verde), 34 (azul), 35 (rojo discontinuo), 36 (verde discontinuo) y 37 (azul discontinuo). No hay correlación entre el orden  $n$  y la energía mínima en que aparecen, sino un ordenamiento con efecto *rebote*.

so, no suele ser tenido en cuenta en un modelo de tratamiento continuo del problema como es el que usamos aquí.

Construimos las funciones de onda siguiendo la expresión general de los estados de la cinta Eq[6.4]. Un electrón en la zona I con energía  $E = s\hbar v_F \epsilon$  y modo  $\alpha$ , procedente del surtidor idealmente situado en  $-\infty$ , incide sobre la

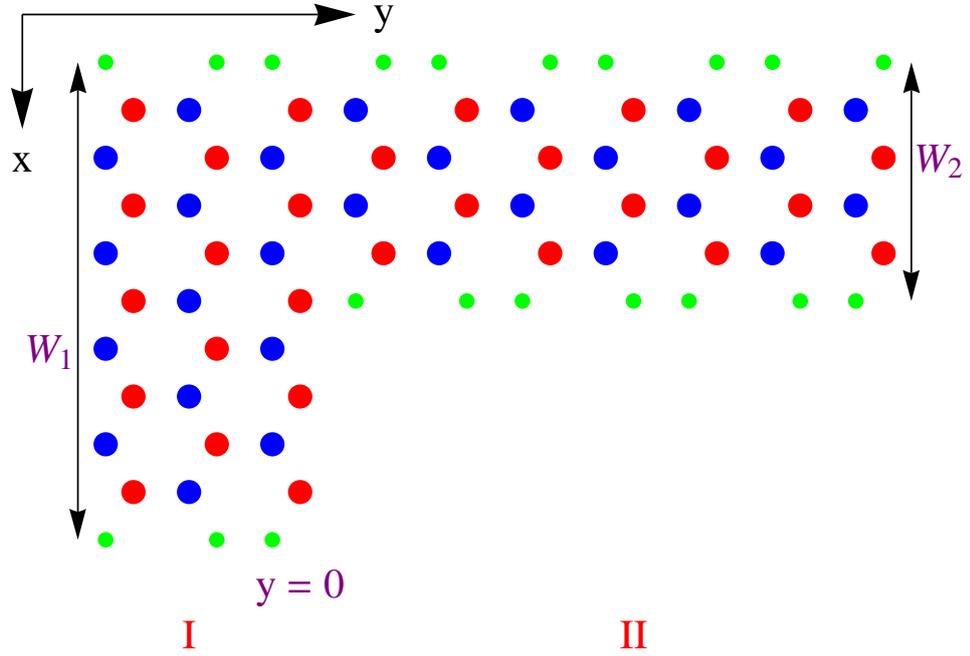


Figura 6.4: Unión ancho - estrecho ( $W_1 - W_2$ ) en una AGNR. Cada zona se supone semiinfinita a lo largo del eje  $y$ .

*interface ancho-estrecho.* En dicha interface se produce en la zona I una onda reflejada con todos los momentos posibles, incluidos los correspondientes a ondas evanescentes, compatibles con el valor de energía de la onda incidente. En la interface también se produce en la zona II una onda transmitida en sentido  $+\infty$  con todos los momentos posibles en dicha zona.

La conexión entre los estados en las dos zonas, ancha y estrecha, se realiza imponiendo la continuidad de la función de onda en el límite entre zonas eje  $y = 0$ . Las condiciones de contorno naturales (suponemos que la cinta ancha termina en átomos de la red A) son:

$$\Psi_I^A(x, 0) = \begin{cases} \Psi_{II}^A(x, 0) & \text{si } 0 \leq x \leq W_2, \\ 0 & \text{si } W_2 < x \leq W_1, \end{cases} \quad (6.9)$$

$$\Psi_I^B(x, 0) = \begin{cases} \Psi_{II}^B(x, 0) & \text{si } 0 \leq x \leq W_2, \\ \text{---} & \text{si } W_2 < x \leq W_1. \end{cases} \quad (6.10)$$

Dado que no hay átomos de B en la interfaz, no hay condición para  $\Psi_I^B(x, 0)$  en  $W_2 < x \leq W_1$ , que puede tomar cualquier valor, lo cual hemos representado por una línea discontinua. Con respecto a las expresiones anteriores Eq[6.9-6.10], si en lugar de finalizar la cinta ancha en átomos de la red A, hubiese sido en átomos de la red B, intercambiaríamos en las ecuaciones

anteriores  $A$  por  $B$ .

Podemos extraer las amplitudes de scattering proyectando estas ecuaciones, primero en la zona ancha de la cinta y después en la estrecha obteniendo relaciones suficientes para determinar los coeficientes de reflexión y transmisión para cada estado incidente.

$$r[p, \alpha] = -\frac{Q_{1-}[p]}{Q_{1+}[p]} \delta_{p\alpha} + \sum_{j=1}^{\infty} \sqrt{\frac{W_2}{W_1}} \frac{Q_{2-}[j]}{Q_{1+}[p]} S[p, j] t[j, \alpha] \quad (6.11)$$

$$-2i \sqrt{\frac{W_2}{W_1}} \frac{k_{1y}[\alpha]}{Q_{1+}[\alpha]} S[\alpha, n] = \sum_{m,j=1}^{\infty} \left( \frac{W_2}{W_1} \frac{Q_{2-}[m]}{Q_{1+}[j]} S[j, n] S[j, m] - \delta_{nm} \right) t[m, \alpha] \quad (6.12)$$

siendo

$$S[a, b] = \frac{2}{W_2} \int_0^{W_2} \sin \left[ \frac{a \pi}{W_1} x \right] \sin \left[ \frac{b \pi}{W_2} x \right] dx = \frac{2}{\pi} (-1)^b \frac{b \sin \left[ \frac{a W_2}{W_1} \pi \right]}{\left( \frac{W_2}{W_1} \right)^2 a^2 - b^2} \quad (6.13)$$

En la práctica, para cada cinta en concreto y para cada valor de energía, el sistema anterior Eq[6.11-6.13], que constituye un sistema lineal de ecuaciones algebraicas, tiene que resolverse numéricamente.

Las condiciones de contorno impuestas sobre las funciones de onda y su continuidad en el límite entre zonas, hace que la densidad de corriente sea también continua. Puesto que la densidad de corriente y la corriente son independientes de la coordenada  $y$ , podemos elegir las expresiones para la misma en cualquiera de las dos regiones, puesto que son idénticas. Elegimos la expresión correspondiente a la corriente transmitida, como se acostumbra. La intensidad de corriente transportada por un estado incidente  $\alpha$  procedente del surtidor y la transmitida al drenador, transportada por todos los estados propagantes, resultan ahora, para este nuevo sistema contable de estados que caracteriza la nanocinta de anchura finita,

$$I_{inc}[\alpha] = -s \frac{e v_F}{\epsilon} k_{1y}[\alpha], \quad I_{trans}[\alpha] = -s \frac{e v_F}{\epsilon} \sum_{j \text{ prop}} |t[j, \alpha]|^2 k_{2y}[j], \quad (6.14)$$

y el coeficiente de transmisión para el modo incidente  $\alpha$ :

$$T[\alpha] = \frac{I_{trans}[\alpha]}{I_{inc}[\alpha]} = \sum_{j \text{ prop}} \left| t[j, \alpha] \right|^2 \frac{k_{2y}[j]}{k_{1y}[\alpha]} \quad (6.15)$$

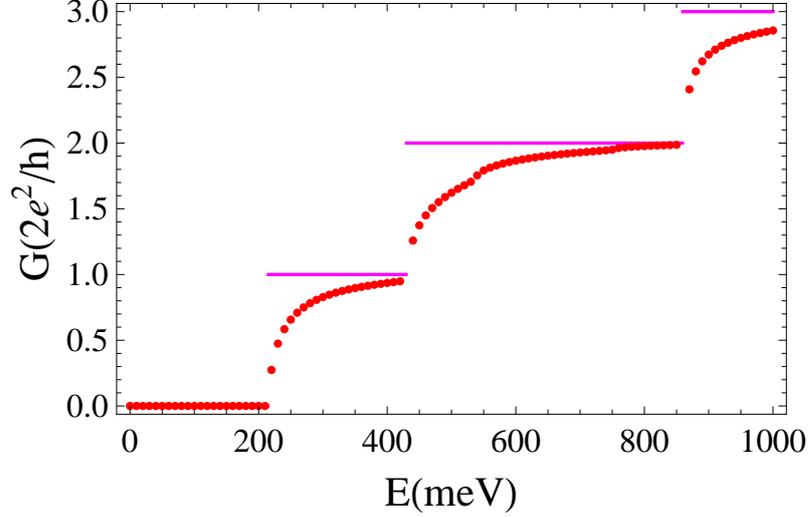


Figura 6.5: Conductancia frente a la energía para un estrechamiento de una AGNR, siendo  $W_1 = 26 \cdot a$  y  $W_2 = 13 \cdot a$  (rojo). Conductancia *ideal* de la cinta estrecha  $W = 13 \cdot a$  (lila). La conductancia a través del estrechamiento viene determinada básicamente a partir del número de modos propagantes de la cinta estrecha.

donde *la suma recorre solamente los estados propagantes* (y no los evanescentes), que son los que contribuyen a la corriente. Para obtener el coeficiente de transmisión total hay que hacer la suma sobre todos los modos entrantes  $\alpha$  que se propagan por la cinta, siendo la conductancia proporcional a ella.

$$G = \frac{2e^2}{h} T = \frac{2e^2}{h} \sum_{\alpha} T[\alpha] \quad (6.16)$$

En la figura Fig. 6.5 representamos en rojo la conductancia frente a la energía de los portadores para una cinta AGNR que presenta un estrechamiento, pudiendo considerarse como dos nanocintas semiinfinitas con anchuras  $W_1 = 26 \cdot a$  y  $W_2 = 13 \cdot a$ , mientras que en lila representamos la conductancia *ideal* asociada al número de modos propagantes de la cinta semiconductor estrecha  $W = 13 \cdot a$  que contribuyen a la conducción, teniendo en cuenta que *idealmente* cada modo va a contribuir con una conductancia de  $2e^2/h$  puesto que suponemos longitud infinita y por tanto la transición entre escalones es abrupta al no existir scattering [144]. Sin embargo, si hubiese sido una cinta armchair metálica o zigzag los plateaus estarían separados  $4e^2/h$  ya que entonces se preservarían las simetrías de spin y de valle [88].

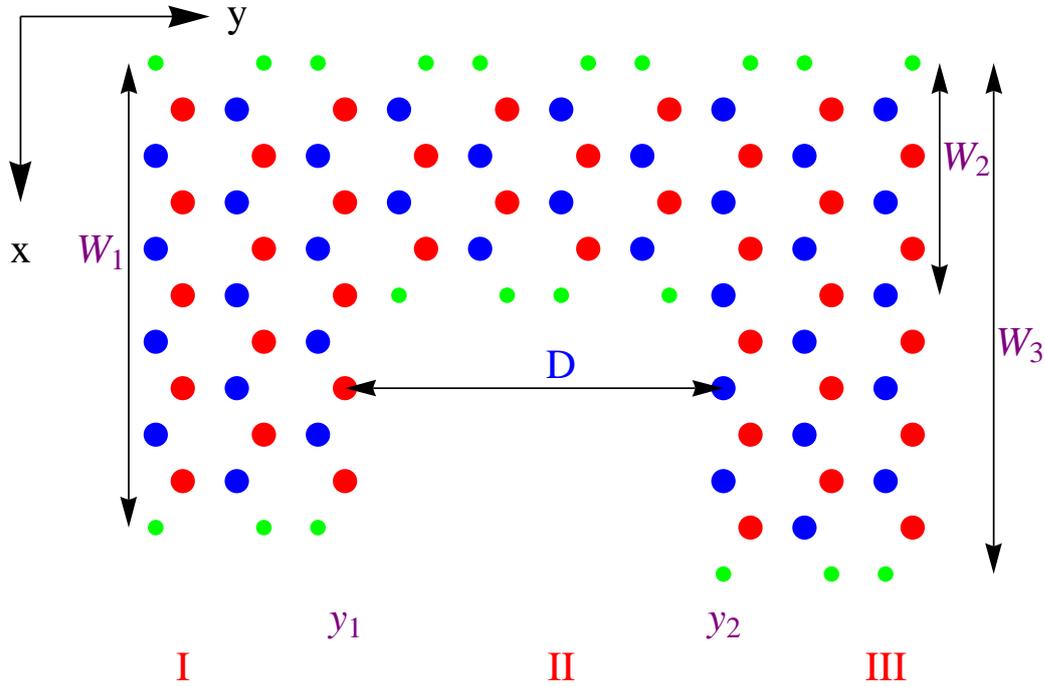


Figura 6.6: Constricción en una AGNR :  $W_1 - W_2 - W_3(D)$ , siendo  $D$  la distancia entre las zonas extremas, semiinfinitas a lo largo del eje  $y$ . La relación entre  $D$  y el número de hexágonos  $h$  es :  $D = \frac{3h-1}{2} \cdot \frac{a}{\sqrt{3}}$ .

Aunque el número de modos de la cinta ancha y de la estrecha es diferente, la conducción a través del estrechamiento va a venir definida principalmente mediante el número de modos propagantes en la cinta estrecha.

## 6.4. Nanoconstricción rectangular en una nanocinta

Una nanoconstricción de grafeno (GNC) es un estrechamiento localizado, de una longitud nanométrica, en una nanocinta de grafeno en el camino de la corriente de portadores. Cuando las dimensiones del estrechamiento, largo y ancho, son semejantes, a la nanoconstricción se le llama punto cuántico de grafeno (GQPC) [145]. A continuación consideramos una nanoconstricción con forma rectangular en una cinta AGNR, que denotamos  $W_1 - W_2 - W_3(D)$  y medimos en hexágonos. Básicamente, este sistema constituye una ampliación del caso anterior, donde ahora tenemos tres zonas (en vez de dos) como

se muestra en la figura Fig. 6.6, claramente diferenciadas por sus anchuras en la AGNR. Las zonas I, II y III de anchuras respectivas  $W_1$ ,  $W_2$  y  $W_3$ , deben verificar las condiciones  $W_2 < W_1$  y  $W_2 < W_3$  para que efectivamente sea una constricción. La distancia entre la zona I y la zona III es  $D$ , por lo que la constricción viene definida a partir de su anchura  $W_2$  y longitud  $D$ , siendo  $D = [(3h - 1)/2] \cdot (a/\sqrt{3})$ , siendo  $h$  el número de hexágonos. Los límites entre las tres zonas están situados por tanto en  $y = y_1$  y en  $y = y_2 = y_1 + D$ . Se pueden considerar nanoconstricciones tanto asimétricas con  $W_1 \neq W_3$ , como simétricas con  $W_1 = W_3$ . Para este trabajo se ha elaborado el cálculo general aplicable a ambos tipos de nanoconstricciones, pero las simulaciones se han realizado sólo para el caso simétrico.

Para aplicar las condiciones de contorno, consideramos el acabado de la cinta. Elegimos que el borde de la nanoconstricción en  $y = y_1$  termine en átomos de la subred  $A$ , y debido a la geometría de la red hexagonal del grafeno, tendremos que el borde en  $y = y_2$  terminará en átomos de la subred  $B$ . Si hubieramos hecho la suposición contraria, intercambiaríamos  $A$  por  $B$ . Como consecuencia de la simetría del hamiltoniano, el coeficiente de transmisión no cambiaría para dicho caso. Despreciamos, de nuevo la muy pequeña separación de  $a_0/2$  entre la columna con átomos de la subred  $A$  y la columna con átomos de la subred  $B$ .

Las condiciones de contorno que hemos de imponer son:

$$\Psi_I^A(x, y_1) = \begin{cases} \Psi_{II}^A(x, y_1) & \text{si } 0 \leq x \leq W_2, \\ 0 & \text{si } W_2 < x \leq W_1, \end{cases} \quad (6.17)$$

$$\Psi_I^B(x, y_1) = \begin{cases} \Psi_{II}^B(x, y_1) & \text{si } 0 \leq x \leq W_2, \\ \text{—} & \text{si } W_2 < x \leq W_1, \end{cases} \quad (6.18)$$

$$\Psi_{III}^B(x, y_2) = \begin{cases} \Psi_{II}^B(x, y_2) & \text{si } 0 \leq x \leq W_2, \\ 0 & \text{si } W_2 < x \leq W_3, \end{cases} \quad (6.19)$$

$$\Psi_{III}^A(x, y_2) = \begin{cases} \Psi_{II}^A(x, y_2) & \text{si } 0 \leq x \leq W_2, \\ \text{—} & \text{si } W_2 < x \leq W_3, \end{cases} \quad (6.20)$$

Aplicamos estas condiciones de contorno a las funciones de onda de las tres zonas, y proyectamos el estado electrónico en las zonas anchas y estrecha de la cinta, obteniendo el siguiente conjunto de ecuaciones:

$$r[p, \alpha] = -\frac{Q_{1-}[p]}{Q_{1+}[p]}\delta_{p\alpha} + \sum_{j=1}^{\infty} \sqrt{\frac{W_2}{W_1}} S[p, j] \left( \frac{Q_{2-}[j]}{Q_{1+}[p]} C_{+}[j, \alpha] + \frac{Q_{2+}[j]}{Q_{1+}[p]} C_{-}[j, \alpha] \right), \quad (6.21)$$

$$\sum_{j=1}^{\infty} \sqrt{\frac{W_2}{W_3}} Q_{3-}[j] R[j, p] t[j, \alpha] = Q_{2-}[p] e^{iDk_{2y}[p]} C_{+}[p, \alpha] + Q_{2+}[p] e^{-iDk_{2y}[p]} C_{-}[p, \alpha], \quad (6.22)$$

$$\sum_{j=1}^{\infty} \sqrt{\frac{W_2}{W_1}} S[j, p] r[j, \alpha] = -\sqrt{\frac{W_2}{W_1}} S[\alpha, p] + C_{+}[p, \alpha] + C_{-}[p, \alpha], \quad (6.23)$$

$$t[p, \alpha] = \sum_{j=1}^{\infty} \sqrt{\frac{W_2}{W_3}} R[p, j] \left( e^{iDk_{2y}[j]} C_{+}[j, \alpha] + e^{-iDk_{2y}[j]} C_{-}[j, \alpha] \right), \quad (6.24)$$

siendo  $S[a, b]$  como en la expresión Eq[6.13] y  $R[a, b]$

$$R[a, b] = \frac{2}{W_2} \int_0^{W_2} \sin \left[ \frac{a\pi}{W_3} x \right] \sin \left[ \frac{b\pi}{W_2} x \right] dx = \frac{2}{\pi} (-1)^b \frac{b \sin \left[ \frac{aW_2}{W_3} \pi \right]}{\left( \frac{aW_2}{W_3} \right)^2 - b^2} \quad (6.25)$$

Las ecuaciones Eq[6.21-6.24] resuelven el problema de determinar, para un estado entrante dado, todos los coeficientes por medio de un sistema lineal de infinitas ecuaciones algebraicas. En la práctica, para unos valores determinados de los parámetros de la cinta, se resuelve el sistema lineal anterior truncándolo en un valor conveniente que determina la precisión del cálculo. Se calcula el coeficiente de transmisión de cada modo conductor por medio de la expresión Eq[6.15], y luego la conductancia de la cinta con Eq[6.16].

Enfocamos nuestro análisis en la dependencia del transporte con factores geométricos tales como la relación entre las anchuras de las zonas extremas y de la zona intermedia, así como la longitud de ésta. Vamos a representar la conductancia de la cinta Eq[6.16] en función de la energía de los portadores para cuatro diferentes combinaciones: zona intermedia metálica (M) o semiconductora (S) con extremos metálicos (M) o semiconductores (S). Comparamos en la misma gráfica nuestros resultados con los obtenidos por

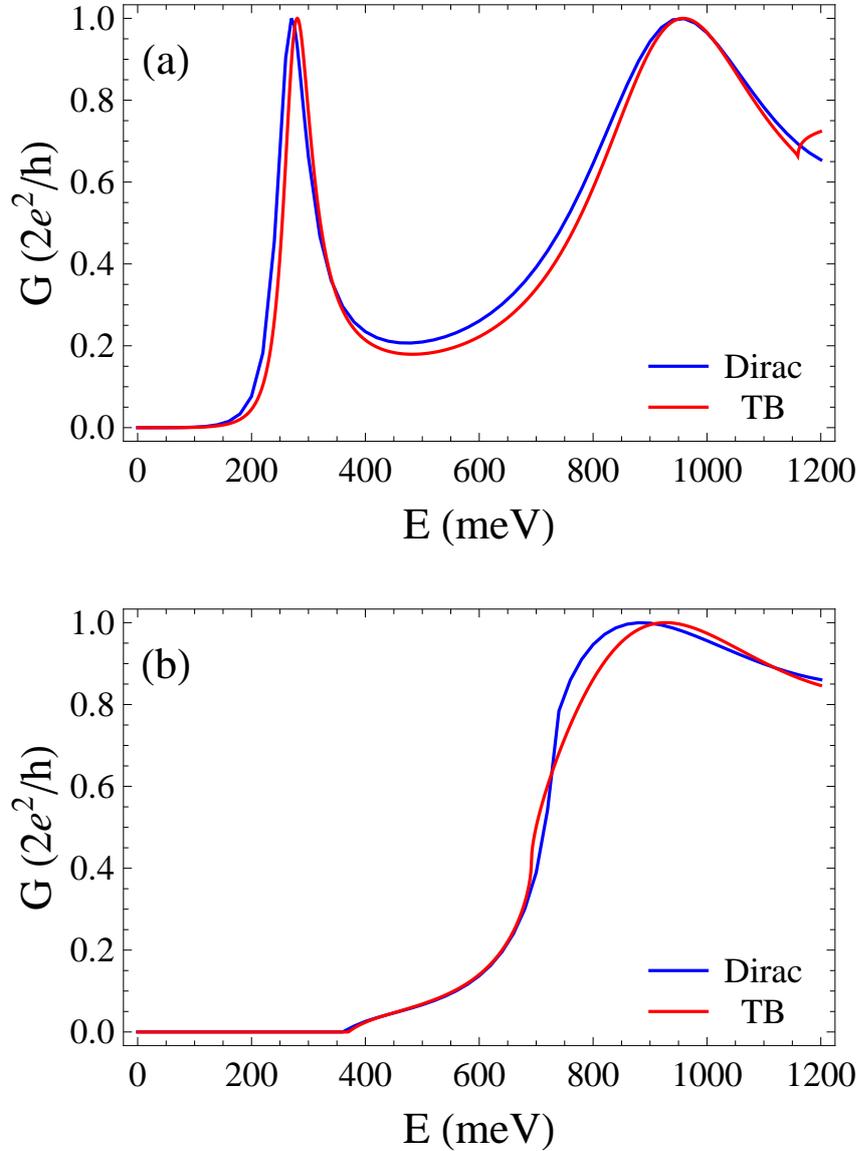


Figura 6.7: (a) Conductancia para las constricciones 6 - 3 - 6 (9) mediante las ecuaciones de Dirac en azul y tight-binding en rojo. (b) Idem para 7 - 3 - 7 (9). Obsevamos un buen acuerdo entre los métodos de las ecuaciones de Dirac y tight-binding.

el grupo *Quantum Nanosystem Group* de la Universidad Complutense en la simulación de estas mismas cintas mediante el método tight-binding.

En la figura Fig. 6.7 (a) representamos el caso 6 - 3 - 6 (9) correspon-

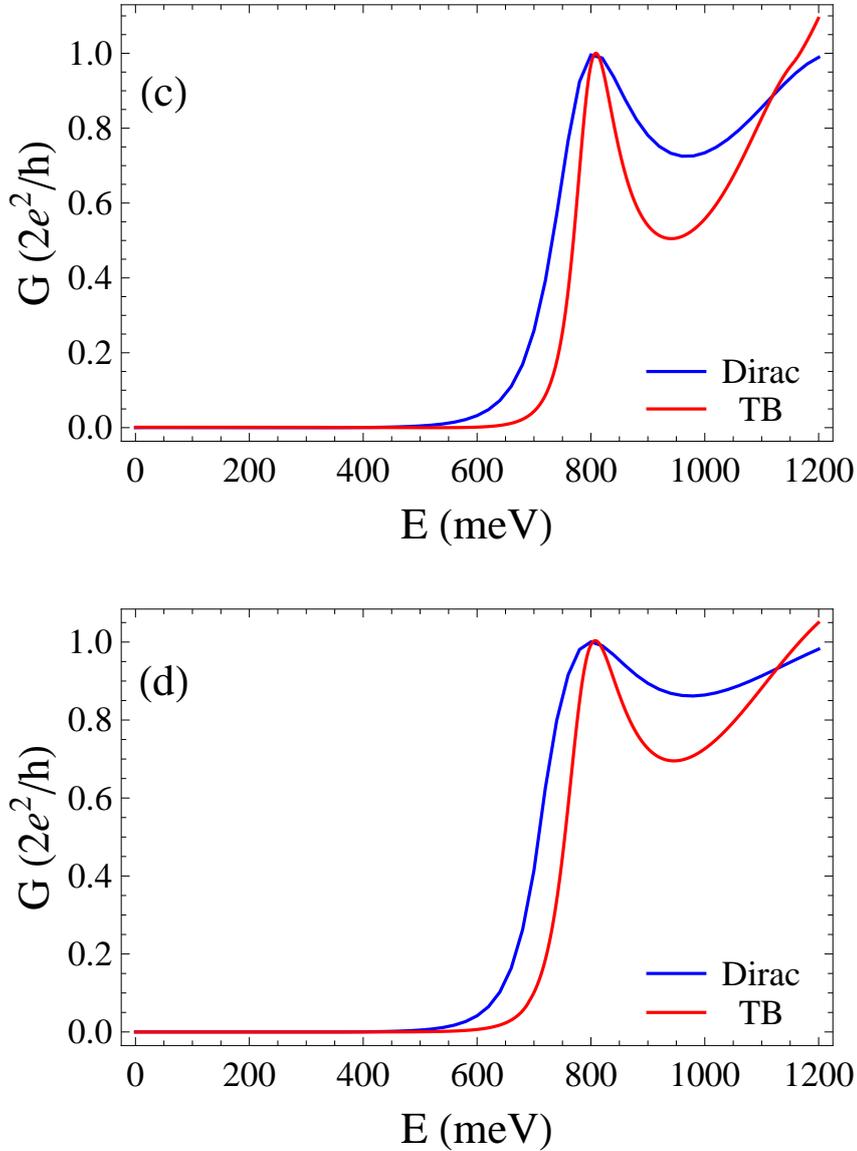


Figura 6.8: (c) Conductancia para las constricciones 6 - 4 - 6 (9) mediante las ecuaciones de Dirac en azul y tight-binding en rojo. (d) Idem para 7 - 4 - 7 (9). Observamos un cierto acuerdo entre el método de las ecuaciones de Dirac y el tight-binding.

diente a una cinta de tipo M-M-M, y en (b) el caso 7 - 3 - 7 (9) de tipo S-M-S. En ambos casos la zona intermedia es metálica, y el acuerdo entre el método utilizando las ecuaciones de Dirac desarrolladas y el método tight-

binding es bueno. En la figura (b) la conductancia comienza a crecer cuando se alcanza la energía a la cual empieza a contribuir el primer modo de la cinta más ancha. En la figura Fig. 6.8 (c) representamos el caso 6 - 4 - 6 (9) correspondiente a una cinta de tipo M-S-M, y en (d) el caso 7 - 4 - 7 (9) de tipo S-S-S. Es decir, en ambos casos la zona intermedia es semiconductor, y el acuerdo entre ambos métodos se aleja sobre todo en los mínimos, aunque en el máximo local coinciden. En todas estas figuras Fig. 6.7 - 6.8, la conductancia está condicionada principalmente por las características de la cinta más estrecha. En las cintas AGNR de anchura 3 o 4 hexágonos (o constantes de red) que se están simulando, existe como máximo un modo activo de conducción, y por ello en las representaciones, la conductancia no supera el valor unidad en unidades de  $2e^2/h$ .

Inicialmente habíamos pensado utilizar el método de la ecuación de Dirac para resolver una nanoconstricción porque el método tight-binding a partir de ciertas dimensiones resultaba impracticable. Sin embargo, nuestra sorpresa surgió cuando observamos que nuestro método presentaba problemas de convergencia, incluso para anchuras de la cinta relativamente pequeñas. Así, el método tight-binding resultó más ventajoso.

Buscábamos investigar las propiedades de transporte de los electrones y los efectos de cuantización asociados al tamaño en una GNC. Para ello nuestro grupo de investigación *Nanotechnology Group* de la Universidad de Salamanca ha utilizado un método de fabricación de grafeno que permite un buen procesado litográfico con elevada calidad cristalina, al mismo tiempo que mantiene una elevada movilidad de los portadores [146, 147]. La rugosidad del borde en la muestra experimental es pequeña, es decir del orden de 1 ó 2 nm, lo cual es conveniente ya que un aumento en la rugosidad conlleva un aumento en el scattering. En la figura Fig. 6.9 en (a) se muestra una imagen SEM de nuestro dispositivo, que consiste en una barra de grafeno de  $1 \times 2 \mu\text{m}^2$ , y una constricción  $85 \times 85 \text{ nm}^2$ , y en (c) se representan las dimensiones geométricas. Las muestras utilizadas tienen un pico de Dirac próximo a cero voltios debido a la baja interacción del grafeno con el substrato. GNC similares basadas en heteroestructuras de grafeno y h-BN eran estudiadas por Terrés [135], que aunque también consiguieron elevada movilidad para los portadores, la anchura de la constricción superaba los 200 nm debido al proceso de grabado utilizado en la heteroestructura. Otro tipo de GNC para anchuras menores de 200 nm era realizado con grafeno encapsulado por Kumar [138], sin embargo la rugosidad en el borde no era despreciable. Anteriormente Tombrós [134] había realizado pequeñas GNC en grafeno suspendido con elevada movilidad, sin embargo la técnica de fabricación utilizada no estaba bien definida. Otro tipo considerado era GNC

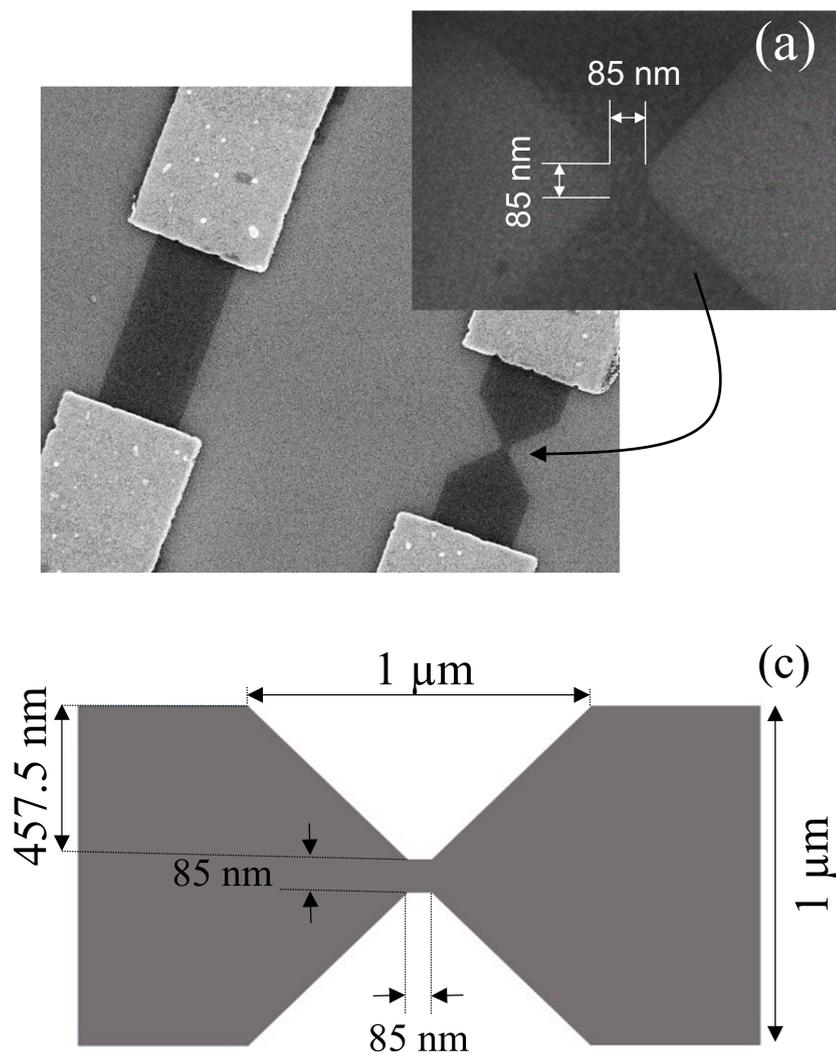


Figura 6.9: (a) Imagen SEM de una cinta de  $1 \times 2 \mu\text{m}^2$  y una GNC de  $85 \times 85 \text{ nm}^2$ . (c) Imagen geométrica de la constricción.

sobre obleas de Si/SiO<sub>2</sub>, que presenta baja rugosidad de borde y un buen control del tamaño, sin embargo la movilidad de los electrones era muy baja debido al contacto directo entre grafeno y óxido [132,137], lo cual evita una buena observación de los efectos asociados a la cuantización por tamaño.

En la figura Fig. 6.10 se representa la conductancia frente a la magnitud adimensional  $W \cdot k_F$ , donde  $W$  es la anchura de la constricción y  $k_F = \sqrt{\pi n}$

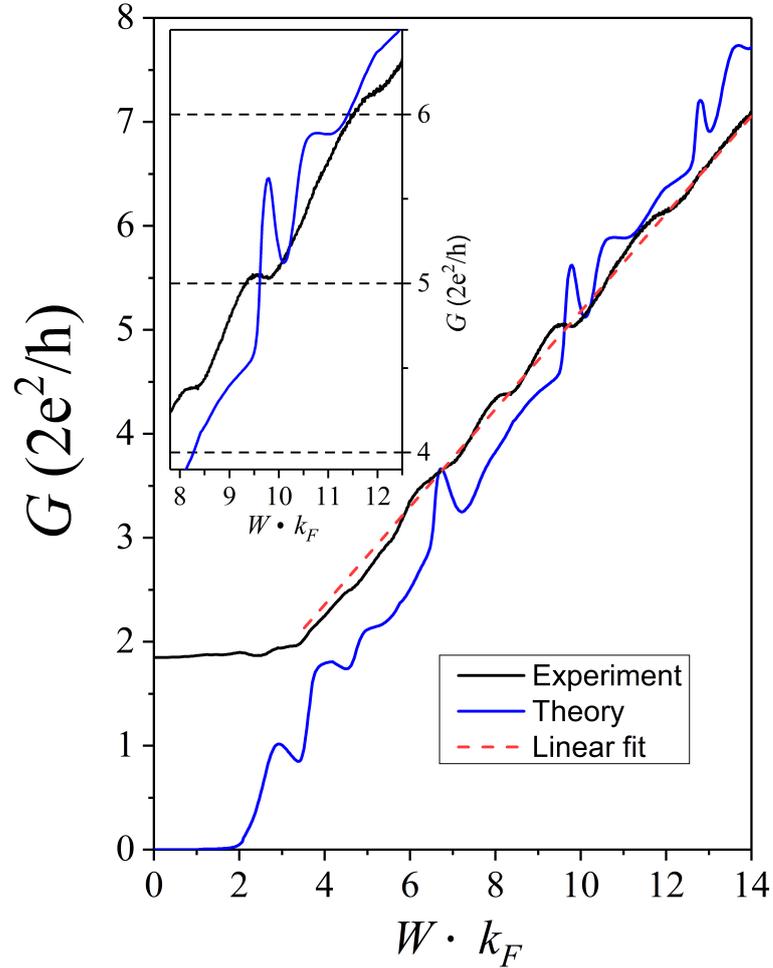


Figura 6.10: Conductancia frente a la magnitud adimensional  $W \cdot k_F$ . La línea negra corresponde a la medida a baja temperatura, mostrando la tendencia lineal esperada, cuyo ajuste se representa mediante una línea discontinua. La línea azul muestra el resultado de la simulación teórica.

es el número de onda de Fermi. La densidad de portadores  $n$  estaba relacionada con la tensión back-gate  $V_{bg}$  mediante  $n = (C_{ox}/e)(V_{bg} - V_{CNP})$  donde  $C_{ox}$  es la capacidad del  $\text{SiO}_2$  por unidad de área,  $e$  es la carga elemental, y  $V_{CNP}$  es el voltaje en el punto de Dirac. La línea azul muestra el resultado de la simulación teórica realizada mediante la aproximación tight-binding a los vecinos más próximos por colaboradores pertenecientes al grupo *Quantum Nanosystem Group* de la Universidad Complutense de de la GNC con bordes rectos, donde se ha supuesto que la cinta de partida es armchair. La línea negra corresponde a la conductancia medida a baja temperatura (5 K),

mostrando la tendencia lineal esperada, asociada al régimen balístico, cuyo ajuste se representa mediante una línea discontinua. Esto es cierto salvo para valores bajos de  $W \cdot k_F$  donde aparece una pequeña contribución adicional debida a un dopado residual en la muestra de grafeno, lo cual evita poder realizar experimentalmente una densidad de portadores nula. Los resultados de la figura Fig. 6.10 son semejantes a los obtenidos por Yannouleas [131] que encontró picos en la conductancia de sus nanoconstricciones y los atribuyó a la cuantización longitudinal debida a la longitud finita de la GNC. Las pendientes de las líneas negra y azul son muy semejantes, y la pequeña diferencia entre ambas procede de imperfecciones como bordes más redondeados en las esquinas de la GNC real. En general podemos decir que los datos obtenidos experimentalmente y las simulaciones numéricas muestran un buen acuerdo.

## 6.5. Resumen y conclusiones

El propósito de este capítulo fue inicialmente utilizar el formalismo de Dirac, para aplicarlo en una nanoconstricción realizada sobre una cinta AGNR, que se iba a realizar en el laboratorio. Para ello se comenzó aplicando el formalismo a nanocintas AGNR, en las cuales debido a la anchura *finita*, el vector de onda transversal resultaba cuantizado, dando lugar a un conjunto finito de modos de propagación; lo cual constituye la diferencia fundamental con el comportamiento de la lámina de grafeno ilimitada. El número de modos propagantes  $N$  en una AGNR aumentaba con la anchura de la cinta  $W$  y con la energía  $\epsilon$ . Posteriormente realizamos un estrechamiento de una cinta AGNR, obteniendo que la conductancia viene dada a partir del número de modos que se propagan en la parte estrecha de la cinta. Para comprobarlo, comparamos la conductancia del estrechamiento de una AGNR con la conductancia ideal asociada a la cinta estrecha.

Siguiendo un proceso semejante al utilizado para el estrechamiento, estudiamos una nanoconstricción rectangular para una cinta AGNR, con el propósito de poder utilizarlo cuando en el laboratorio obtuviésemos la nanoconstricción de grafeno. Una vez obtenido el desarrollo matemático, lo aplicamos a una cinta estrecha para comparar los resultados con los obtenidos mediante el método tight-binding. Encontramos que cuando la constricción era metálica los resultados mostraban un acuerdo relativamente bueno, que se separaba claramente cuando la zona intermedia era semiconductor. Además al aumentar la anchura de la cinta, nuestro método presentaba problemas de convergencia. Por todo ello, junto con las ventajas que presentaba el método tight-binding de ser escalable y poder definir la forma de los bordes, hizo

aconsejable utilizar este último método para realizar la comparación con los resultados experimentales. En nuestro grupo se realizó una GNC mediante un proceso litográfico que estaba bien definido, con una rugosidad de bordes muy pequeña y que además presentaba una elevada movilidad para los portadores. Posteriormente se obtuvo una dependencia lineal entre la conductancia y  $k_F$ , como cabía esperar para un régimen balístico, tanto desde el punto de vista experimental como a partir de la aproximación tight-binding utilizada.

# Apéndice A

## Densidad de portadores

### A.1. Expresión general para la densidad de portadores

Para calcular la densidad de portadores en el grafeno, necesitamos conocer la densidad de estados  $g(E)$  - el número de estados en un intervalo unitario de energía para una superficie unitaria de grafeno-, así como la probabilidad de que éstos estén ocupados  $f(E)$ . Si en una superficie unitaria de grafeno tenemos  $dZ$  estados cuánticos en el intervalo de energías entre  $E$  y  $E + dE$ , entonces

$$g(E) = \frac{dZ}{dE} \quad (\text{A.1})$$

La probabilidad de llenado del estado con energía  $E$  es igual a  $f(E)$ , por lo que el número de electrones es:

$$dn = f(E)dZ = f(E)g(E)dE \quad (\text{A.2})$$

El número total de electrones cuyas energías están comprendidas entre  $E_1$  y  $E_2$  es:

$$n = \int_{E_1}^{E_2} f(E)g(E)dE \quad (\text{A.3})$$

En dos dimensiones [7], el número total de estados en el intervalo de energías entre  $E$  y  $E + dE$  es el área diferencial en el espacio recíproco  $\vec{K}$  dividido entre el área que ocupa un estado  $\vec{k}$  de este espacio

$$g(E)dE = m \cdot \frac{2\pi k dk}{(2\pi)^2} \quad (\text{A.4})$$

Puesto que  $E = \hbar v_F k$  podemos escribir la expresión Eq[A.4] en función de la energía

$$g(E)dE = m \cdot \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{EdE}{(\hbar v_F)^2} = \frac{2}{\pi} \cdot \frac{EdE}{(\hbar v_F)^2} \quad (\text{A.5})$$

puesto que  $m = 4 = 2 \times 2$ , un 2 asociado a la degeneración de spín, y el otro 2 asociado a la degeneración de valle, por lo que la densidad de estados es:

$$g(E) = \frac{2}{\pi} \cdot \frac{E}{(\hbar v_F)^2} \quad (\text{A.6})$$

La densidad de estados es un número positivo, por lo que para huecos (con energía negativa) es necesario tomar el módulo en la expresión anterior.

La probabilidad de ocupación para electrones está dada por la función de distribución de Fermi-Dirac

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/k_B T}} \quad (\text{A.7})$$

La densidad de electrones  $n$  en equilibrio, dentro de todo el rango posible de energías, es:

$$n = \frac{2}{\pi(\hbar v_F)^2} \int_0^\infty \frac{E}{1 + e^{(E-E_F)/k_B T}} dE \quad (\text{A.8})$$

A continuación se hace el cambio de variable  $\eta = E/k_B T$  y  $\eta_F = E_F/k_B T$

$$n = \frac{2}{\pi} \left( \frac{k_B T}{\hbar v_F} \right)^2 \int_0^\infty \frac{\eta}{1 + e^{\eta - \eta_F}} d\eta \quad (\text{A.9})$$

donde esta integral representa la integral de Fermi-Dirac de orden 1, ya que en general la integral de Fermi-Dirac de orden  $s$  se expresa como:

$$F_s = \int_0^\infty \frac{\eta^s}{1 + e^{\eta - \eta_F}} d\eta \quad (\text{A.10})$$

Por lo que la expresión exacta para la densidad de electrones [148] es:

$$n = \frac{2}{\pi} \left( \frac{k_B T}{\hbar v_F} \right)^2 F_1 \left( \frac{E_F}{k_B T} \right) \quad (\text{A.11})$$

Se pueden analizar los casos extremos: caso no degenerado ( $\eta_F \ll 0$ ) y el caso degenerado ( $\eta_F \gg 0$ ).

Para el caso no degenerado  $E_F \ll k_B T$ , tenemos la aproximación  $F_1(\eta_F) \rightarrow e^{\eta_F}$ , si además la energía de Fermi es nula obtendríamos una dependencia cuadrática con la temperatura

$$n \simeq \frac{2}{\pi} \left( \frac{k_B T}{\hbar v_F} \right)^2 \quad (\text{A.12})$$

Para el caso degenerado, cuando  $E_F \gg k_B T$  entonces  $F_1(\eta_F) \rightarrow \frac{1}{2} \eta_F^2$ , por lo que la densidad de portadores [149] es:

$$n \simeq \frac{2}{\pi} \left( \frac{k_B T}{\hbar v_F} \right)^2 \cdot \frac{1}{2} \left( \frac{E_F}{k_B T} \right)^2 = \frac{1}{\pi} \left( \frac{E_F}{\hbar v_F} \right)^2 \quad (\text{A.13})$$

Debido a la relación de dispersión simétrica para electrones y huecos, obtendríamos para huecos una expresión semejante a Eq[A.11]. Además, teniendo en cuenta que la función de distribución de huecos es  $1 - f(E)$ , la expresión exacta para la densidad de huecos es:

$$p = \frac{2}{\pi} \left( \frac{k_B T}{\hbar v_F} \right)^2 F_1 \left( -\frac{E_F}{k_B T} \right) \quad (\text{A.14})$$



---

## *Conclusiones*

---

Hemos calculado analíticamente el coeficiente de transmisión para una lámina de grafeno de anchura indefinida sometida a una o dos barreras de potencial unidimensional. Para construir los estados electrónicos, hemos tenido en cuenta las simetrías del hamiltoniano de Dirac que describe a los electrones en la lámina. Se concluye que tanto la energía de los portadores como la componente perpendicular de su vector de onda, deben mantenerse constantes. La relación entre el ángulo de incidencia y el de transmisión en una barrera de potencial depende de la energía del electrón incidente y de la altura de la barrera de potencial  $U_0$ . Bajo ciertas condiciones ( $E > 0.5 U_0$ ) aparece un ángulo límite, de tal forma que para ángulos superiores, la transmisión es mediante estados evanescentes en lugar de estados propagantes.

El coeficiente de transmisión resulta unitario para incidencia perpendicular, y también en otros ángulos que verifiquen ciertas condiciones, ello provoca que no pueda existir confinamiento de portadores de carga mediante una barrera de potencial eléctrico. El coeficiente de transmisión es mínimo, próximo a cero, para ciertos valores de los parámetros, de manera que podemos llegar a obtener un pseudogap de energía.

El mismo modelo ha podido aplicarse al caso de dos barreras de potencial independientes. El coeficiente de transmisión resultante es independiente del orden en el cual coloquemos las barreras de potencial. Asociada a cada barrera de potencial puede aparecer un pseudogap, que dependiendo de los parámetros considerados, llegue a colapsar en un único pseudogap. Al considerar dos barreras de potencial simétricas aparecen unos picos (tipo delta) de resonancia equiespaciados dentro del pseudogap. En la medida en la cual las dos barreras dejen de ser simétricas, esos picos de resonancia se van deteriorando, disminuyendo de amplitud, desplazándose o ensanchándose.

A continuación, hemos construido un modelo para el transistor de efecto de campo de grafeno (GFET) que relaciona los potenciales exteriores aplicados en las puertas del dispositivo con los parámetros utilizados en nuestro modelo. Las variables experimentales que gobiernan el GFET están asociadas a los potenciales aplicados en los terminales de fuente, drenador, puerta superior y puerta inferior. Éstas están asociadas al perfil de la barrera de potencial considerada y a la energía de Fermi de los portadores. Obtenemos una expresión para la conductancia de los GFET bajo ciertas condiciones experimentales, en particular para temperaturas próximas a cero kelvin, y baja polarización. En principio, consideramos incidencia no-perpendicular, para

---

evitar la paradoja de Klein. Además dependiendo del ángulo de incidencia de los portadores sobre la barrera de potencial, la conductancia obtenida es diferente. Inicialmente consideramos que los portadores pueden proceder de todas las direcciones posibles y además llegar a impactar en la barrera de potencial con la misma probabilidad. Posteriormente, tratamos el caso de direcciones privilegiadas, es decir que tienen más probabilidad de proceder de esas direcciones que de otras, lo cual simulamos mediante funciones de ponderación tipo campana de Gauss o tipo delta. Físicamente, esta dispersión que puede suceder al considerar direcciones privilegiadas, la asociamos a muestras con pocas o bastantes inhomogeneidades.

Aplicamos múltiples barreras de potencial a una lámina de grafeno, y en vez de obtener una expresión analítica cerrada (como había sucedido para dos barreras de potencial), utilizamos el Método de la Matriz de Transferencia (MMT). En el caso de múltiples barreras de potencial con la misma altura, realizamos representaciones para el coeficiente de transmisión frente a varios parámetros, como el ángulo de incidencia que da lugar a la aparición de resonancias, la energía con la aparición de minibandas y un pseudogap semejante al obtenido para una única barrera de potencial, pero con la aparición de resonancias muy selectivas en energía dentro de ese pseudogap. En el caso en que varias barreras de potencial sean de diferente altura, observamos que el resultado depende del ordenamiento de dichas barreras, de tal forma que si existe simetría *especular* el resultado es el mismo. Asociado a cada barrera de potencial aparece un mínimo en energía que dependiendo de los parámetros usados se puede convertir en un pseudogap en energía, de tal forma que varios consecutivos podrían llegar a *colapsar* en un único pseudogap. Para diseñar los extremos inferior y superior de un pseudogap necesitamos al menos dos barreras de potencial de diferentes alturas. La posibilidad de crear zonas de transmisión y de pseudogaps mediante voltajes aplicados externamente ofrece la posibilidad de construir un filtro dependiente de la energía.

Por otra parte, la barrera de potencial escalonada permite simular cualquier potencial que varíe suavemente. Nos ha parecido interesante aplicarlo a una función gaussiana. En la representación de su coeficiente de transmisión aparecen varios mínimos en energía, siendo el menor aquel asociado a la barrera de potencial más elevada, a partir de dicha energía es unitario.

Con el fin de mejorar y refinar nuestro modelo, hemos considerado que sobre la lámina de grafeno además de influir las barreras de potencial asociadas a las puertas superiores e inferior  $V_{TG} - V_{BG}$ , también lo hace el campo eléctrico asociado a la diferencia de potencial entre surtidor y drenador  $V_{DS}$ , dando lugar a un *potencial efectivo lineal* en ciertas regiones de la lámina

---

de grafeno. Lo anterior, cambia el potencial y por tanto el Hamiltoniano, lo que nos lleva a construir de nuevo los estados electrónicos, que ahora son diferentes. Ya no resultan de una superposición adecuada de ondas planas, sino que es necesario introducir funciones de Hermite e hipergeométricas.

La consideración del *campo eléctrico* frente al caso en el cual básicamente lo habíamos considerado despreciable, provoca la *pérdida de simetría* para la energía potencial en un sistema compuesto por una lámina de grafeno sometida a una o dos barreras de potencial. Así, en la representación del coeficiente de transmisión frente a la energía aparecen pendientes *finitas* en las paredes laterales de los mínimos o pseudogaps energéticos, con suaves ondulaciones, frente al caso en el cual no existía campo eléctrico que daba lugar a pendientes verticales con fuertes ondulaciones. Para variar el valor del campo eléctrico podemos hacerlo bien variando la energía potencial entre los contactos  $U_S - U_D$ , o bien la anchura de la puerta superior, dando lugar a resultados diferentes. En el primer caso el aumento de  $U_S - U_D$  provoca un aumento en la anchura del pseudogap energético, mientras que en el segundo caso, la disminución de la anchura de la puerta superior provoca una disminución en la pendiente del pseudogap, pero éste se mantiene básicamente constante.

Al someter dos barreras de potencial a campo eléctrico aparecen nuevos efectos que no tenían lugar cuando no existía campo eléctrico. El *orden que ocupan* las distintas barreras de potencial influye en el valor máximo que lleguen a alcanzar cada una de ellas. En consecuencia, la segunda barrera de potencial puede llegar a quedar *enmascarada*, es decir que sea indetectable. También estudiamos dos barreras de potencial sometidas a campo eléctrico que se reducen de modo efectivo a barreras idénticas y dan lugar únicamente a un mínimo al representar el coeficiente de transmisión frente a la energía del portador incidente. El aumento en la distancia de separación entre las dos barreras proporciona un aumento en el número de picos que aparecen, y para ciertos parámetros particulares, aparecen claras resonancias en el pseudogap energético.

En el límite de campo eléctrico elevado, la barrera de potencial puede llegar a *degradarse*, convirtiéndose de *manera efectiva* en una barrera de potencial *triangular*, que estudiamos - aunque las condiciones utilizadas no sean suficientemente adecuadas - como una primera aproximación. En la representación del coeficiente de transmisión frente a la energía, para un mismo campo eléctrico y distintos valores de potencial aplicados a la top gate, observamos que la envolvente de descenso en el mínimo energético es aproximadamen-

---

te igual, mientras que la pendiente ascendente comienza a distintos valores energéticos, relacionados con las diferentes potenciales aplicados a la top gate. Para dos barreras con potencial efectivo igual, observamos algo semejante aunque ahora aparecen muchas *resonancias* dentro del mínimo que no existían para una única barrera triangular.

Finalmente, hemos considerado que nuestra lámina de grafeno se estrecha a lo largo de una dirección, hasta obtener una nanocinta de grafeno, que al tener una anchura finita se caracteriza por un vector de onda transversal cuantizado, dando lugar a un conjunto finito de modos de propagación, a diferencia de lo que sucedía en una lámina de grafeno indefinida. La nanocinta idealmente infinita, sufre a continuación un estrechamiento, de tal forma que se comporta como la unión de una cinta ancha y otra estrecha. La conductancia básicamente viene dada a partir del número de modos que se propagan en la parte estrecha de la cinta, para lo cual comparamos la conductancia del estrechamiento con la de la cinta más estrecha.

El siguiente paso en esta reducción progresiva de las dimensiones, ha sido considerar una *nanoconstricción rectangular* en una nanocinta, con el propósito de poder utilizar los resultados para realizar una comparación con una nanoconstricción que íbamos a realizar en el laboratorio. Comparamos para una nanoconstricción estrecha nuestros resultados con los obtenidos mediante tight-binding, obteniendo que cuando la zona de la constricción era metálica los resultados mostraban acuerdo, que se separaba cuando la zona intermedia era semiconductor. Por lo cual, junto con las ventajas que presentaba el método tight-binding de ser escalable y poder definir la forma de los bordes, hizo aconsejable utilizar este último método para realizar la comparación con el caso experimental. Nuestro grupo realizó una nanoconstricción de grafeno mediante un proceso litográfico que estaba bien definido, con una rugosidad de bordes muy pequeña y elevada movilidad para los portadores. Obtuvimos una dependencia lineal entre la conductancia y  $k_F$ , como cabía esperar para un régimen balístico, tanto desde el punto de vista experimental como a partir de la aproximación tight-binding utilizada.

---

## *Lista de publicaciones*

---

Los artículos publicados relacionados con esta tesis son :

- V. Clericò, J. A. Delgado-Notario, M. Saiz-Bretín, **C. H. Fuentevilla**, A.V. Malyshev, J.D. Lejarreta, E. Diez, F. Domínguez-Adame. *Quantized electron transport through graphene nanoconstrictions*. Phys. Status Solidi A **215**, 19 : 1701065 (2018).  
doi : 10.1002/pssa.201701065.
- **C. H. Fuentevilla**, J. D. Lejarreta, C. Cobaleda, E. Diez. *Angle dependent conductivity in graphene FET transistors*. Solid-State Electronics **104**, 47 (2015).  
doi : 10.1016/j.sse.2014.11.007.
- C. González-Santander, F. Domínguez-Adame, **C.H. Fuentevilla**, E. Diez. *Scattering of massless Dirac particles by oscillating barriers in one dimension*. Phys. Lett. A **378**, 927 (2014).  
doi : 10.1016/j.physleta.2014.01.017.
- J. D. Lejarreta, **C. H. Fuentevilla**, E. Diez, J. M. Cerveró. *An exact transmission coefficient with one and two barriers in graphene*. J. Phys. A: Math. Theor. **46**, 15: 155304 (2013).  
doi : 10.1088/1751-8113/46/15/155304.aa.

Otro artículo también publicado es :

- W. Yu, V. Clericò, **C. Hernández Fuentevilla**, X. Shi, Y. Jiang, D. Sasha, W.K. Lou, K. Chang, D.H. Huang, G. Gumbs, D. Smirnov, C.J. Stanton, Z. Jiang, V. Bellani, Y. Mezziani, E. Diez, W. Pan, S.D. Hawkins, J.F. Klem. *Anomalously large resistance at the charge neutrality point in a zero-gap InAs/GaSb bilayer*. New J. Phys. **20**, 053062 (2018).  
doi : 10.1088/1367-2630/aac595.



# Bibliografía

- [1] H. P. Boehm, R. Setton, and E. Stumpp, “Nomenclature and terminology of graphite intercalation compounds,” *Carbon*, vol. 24, no. 2, p. 241, 1986.
- [2] C. W. J. Beenakker and H. van Houten, “Quantum transport in semiconductor nanostructures,” *Solid State Physics*, vol. 44, p. 1, 1991.
- [3] M. Borunda, H. Henning, and E. Heller, “Ballistic versus diffusive transport in graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 88, p. 125415, 2013.
- [4] A. Mayorov, R. Gorbachev, S. Morozov, L. Britnell, R. Jalil, L. Ponomarenko, P. Blake, K. Novoselov, K. Watanabe, T. Taniguchi, and A. Geim, “Micrometer-scale ballistic transport in encapsulated graphene at room temperature,” *Nano Letters*, vol. 11, no. 6, p. 2396, 2011.
- [5] L. Wang, I. Meric, P. Y. Huang, Q. Gao, Y. Gao, H. Tran, T. Taniguchi, K. Watanabe, L. M. Campos, D. A. Muller, J. Guo, P. Kim, J. Hone, K. L. Shepard, and C. R. Dean, “One-dimensional electrical contact to a two-dimensional material,” *Science*, vol. 342, p. 614, 2013.
- [6] L. Banszerus, M. Schmitz, S. Engels, M. Goldsche, K. Watanabe, T. Taniguchi, B. Beschoten, and C. Stampfer, “Ballistic transport exceeding 28  $\mu\text{m}$  in cvd grown graphene,” *Nano Lett.*, vol. 16, p. 1387, 2016.
- [7] H.-S. P. Wong and D. Akinwade, *Carbon nanotube and graphene device physics*. Cambridge University Press, 2011.
- [8] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, “Electric field effect in atomically thin carbon films,” *Science*, vol. 306, p. 666, 2004.
- [9] A. K. Geim, “Graphene prehistory,” *Physica Scripta*, vol. T146, p. 014003, 2012.

- 
- [10] K. S. Novoselov, “Nobel lecture: Graphene: Materials in the flatland,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 83, no. 3, p. 837, 2011.
- [11] P. R. Wallace, “The band theory of graphite,” *Physical Review*, vol. 71, p. 622, 1947.
- [12] N. Dombey, P. Kennedy, and A. Calogeracos, “Supercritically and transmission resonances in the dirac equation,” *Physical Review Letters*, vol. 85, p. 1787, 2000.
- [13] A. K. Geim and K. S. Novoselov, “The rise of graphene,” *Nature Materials*, vol. 6, p. 183, 2007.
- [14] A. H. C. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, “The electronic properties of graphene,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 81, no. 1, p. 109, 2009.
- [15] M. I. Katsnelson, “Graphene : carbon in two dimensions,” *Materials Today*, vol. 10, p. 20, 2007.
- [16] A. K. Geim, “Graphene : carbon in two dimensions,” *Science*, vol. 324, p. 1530, 2009.
- [17] K. I. Bolotin, K. J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim, and H. L. Stormer, “Ultrahigh electron mobility in suspended graphene,” *Solid State Communications*, vol. 146, p. 351, 2008.
- [18] Y.-M. Lin, C. Dimitrakopoulos, K. A. Jenkins, D. B. Farmer, H.-Y. Chiu, A. Grill, and P. Avouris, “100-ghz transistors from wafer-scale epitaxial graphene,” *Science*, vol. 327, p. 662, 2010.
- [19] J. D. Buron, F. Pizzocchero, P. U. Jepsen, D. H. Petersen, J. M. Caridad, B. S. Jessen, T. J. Booth, and P. Boggild, “Graphene mobility mapping,” *Scientific Reports*, vol. 5, p. 12305, 2015.
- [20] B. Aïssa, N. K. Memon, A. Ali, and M. K. Khraisheh, “Recent progress in the growth and applications of graphene as a smart material : a review,” *Frontiers in Materials*, vol. 2, p. 58, 2015.
- [21] V. Berry, “Impermeability of graphene and its applicatons,” *Carbon*, vol. 62, p. 1, 2013.
- [22] Q. He, S. Wu, Z. Yin, and H. Zhang, “Graphene-based electronic sensors,” *Chemical Science*, vol. 3, p. 1764, 2012.

- 
- [23] Y. Shao, J. Wang, H. Wu, J. Liu, I. A. Aksay, and Y. Lin, "Graphene based electrochemical sensors and biosensors : A review," *Electroanalysis*, vol. 22, no. 10, p. 1027, 2010.
- [24] X. Cao, Y. Shi, W. Shi, G. Lu, X. Huang, Q. Yan, Q. Zhang, and H. Zhang, "Preparation of novel 3d graphene networks for supercapacitor applications," *Small*, vol. 22, p. 3163, 2017.
- [25] M. Zhang, R. Li, X. Chang, C. Xue, and X. Gou, "Hybrid of porous cobalt oxide nanospheres and nitrogen-doped graphene for applications in lithium-ion batteries and oxygen reduction reaction," *Journal of Power Sources*, vol. 290, p. 25, 2015.
- [26] T. Carey, S. Cacovich, G. Divitiny, J. Ren, A. Mansouri, J. M. Kim, C. Wang, C. Ducati, R. Sordan, and F. Torrasi, "Fully inkjet-printed two-dimensional material field-effect heterojunctions for wearable and textile electronics," *Nature Communications*, vol. 8, p. 1202, 2017.
- [27] D. Dragoman and M. Dragoman, "Negative differential resistance of electrons in graphene barrier," *Applied Physics Letters*, vol. 90, p. 143111, 2007.
- [28] D. C. Elias, R. V. Gorbachev, A. S. Mayorov, S. V. Morozov, A. A. Zuhov, P. Blake, L. A. Ponomarenko, I. V. Grigorieva, K. S. Novoselov, F. Guinea, and A. K. Geim, "Dirac cones reshaped by interaction effects in suspended graphene," *Nature Physics*, vol. 7, p. 701, 2011.
- [29] C. Hwang, D. A. Siegel, S. K. Mo, W. Regan, A. Ismach, Y. Zhang, A. Zettl, and A. Lanzara, "Fermi velocity engineering in graphene by substrate modification," *Scientific Reports*, vol. 2, p. 590, 2012.
- [30] G. W. Semenoff, "Condensed-matter simulation of a three-dimensional anomaly," *Physical Review Letters*, vol. 53, p. 2449, 1984.
- [31] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. G. S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, "Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene," *Nature*, vol. 438, p. 197, 2005.
- [32] F. R. S. M. V. Berry, "Quantal phase factors accompanying adiabatic changes," *Proceedings of the Royal Society A*, vol. 392, p. 45, 1984.
- [33] J. Xue, "Berry phase and unconventional quantum hall effect in graphene," *arXiv*, no. 1309.6714v1, 2013.

- 
- [34] D. Xiao, M.-C. Chang, and Q. Niu, "Berry phase effects on electronic properties," *Reviews of Modern Physics*, vol. 82, p. 1959, 2010.
- [35] A. C. Neto, F. Guinea, and N. M. Peres, "Drawing conclusions from graphene," *Physics World*, vol. 19, no. 11, p. 1, 2006.
- [36] M. I. Katsnelson, "Zitterbewegung, chirality, and minimal conductivity in graphene," *The European Physical Journal B*, vol. 51, p. 157, 2006.
- [37] V. V. Pokropivny and V. V. Skorokhod, "Classification of nanostructures by dimensionality and concept of surface forms engineering in nanomaterial science," *Materials Science and Engineering C*, vol. 27, p. 990, 2007.
- [38] R. Mas-Balleste, C. Gómez-Navarro, J. Gómez-Herrero, and F. Zamora, "2d materials : to graphene and beyond," *Nanoscale*, vol. 3, p. 20, 2011.
- [39] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim, "Two dimensional atomic crystals," *PNAS*, vol. 102, no. 30, p. 10451, 2005.
- [40] B. Feng, Z. Ding, S. Meng, Y. Yao, X. He, P. Cheng, L. Cheng, and K. Wu, "Evidence of silicene in honeycomb structures of silicon on ag(111)," *Nano Letters*, vol. 12, p. 3507, 2012.
- [41] Z. Ni, Q. Liu, K. Tang, J. Zheng, J. Zhou, R. Qin, Z. Gao, D. Yu, and J. Lu, "Tunable bandgap in silicene and germanene," *Nano Letters*, vol. 12, p. 113, 2012.
- [42] F. Zhu, W.-J. Chen, Y. Xu, C.-L. Gao, D.-D. Guan, C. Liu, D. Qian, S.-C. Zhang, and J.-F. Jia, "Epitaxial growth of two-dimensional stanene," *Nature Materials*, vol. 14, p. 1020, 2015.
- [43] A. J. Mannix, X.-F. Zhou, B. Kiraly, J. D. Wood, D. Alducin, B. D. Myers, X. Liu, B. D. Fisher, U. Santiago, J. R. Guest, M. J. Yacaman, A. Ponce, A. R. Oganov, M. C. Hersam, and N. P. Guisinger, "Synthesis of borophenes : Anisotropic, two-dimensional boron polymorphs," *Science*, vol. 350, no. 6267, p. 1513, 2015.
- [44] L. Li, J. Kim, G. J. Ye, D. Y. Qiu, F. H. da Jornada, Z. Shi, L. Chen, Z. Zhang, F. Yang, K. Watanabe, T. Taniguchi, W. Ren, S. G. Louie, X. H. Chen, Y. Zhang, and F. Wang, "Direct observation of the layer-dependent electronic structure in phosphorene," *Nature nanotechnology*, vol. 12, p. 21, 2017.

- 
- [45] J. He, K. Hummer, and C. Franchini, "Stacking effects on the electronic and optical properties of bilayer transition metal dichalcogenides  $\text{mos}_2$ ,  $\text{mose}_2$ ,  $\text{ws}_2$  and  $\text{wse}_2$ ," *Physical Review B*, vol. 89, p. 075409, 2014.
- [46] K. F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan, and T. F. Heinz, "Atomically thin  $\text{mos}_2$  : A new direct-gap semiconductor," *Physical Review Letters*, vol. 105, p. 136805, 2010.
- [47] K. S. Novoselov, A. Mishchenko, A. Carvalho, and A. H. C. Neto, "2d materials and the van der waals heterostructures," *Science*, vol. 353, no. 6298, p. aac9439, 2016.
- [48] A. Molle, J. Goldberger, M. Houssa, Y. Xu, S.-C. Zhang, and D. Akinwande, "Buckled two-dimensional xene sheets," *Nature Materials*, vol. 16, p. 163, 2017.
- [49] Y. Cai, C.-P. Chuu, C. M. Wei, and M. Y. Chou, "Stability and electronic properties of two-dimensional silicene and germanene on graphene," *Physical Review B*, vol. 88, p. 245408, 2013.
- [50] A. Gupta, T. Sakthivel, and S. Seal, "Recent development in 2d materials beyond graphene," *Progress in Material Science*, vol. 73, p. 44, 2015.
- [51] A. K. Geim and I. V. Grigorieva, "Van der waals heterostructures," *Nature*, vol. 499, p. 419, 2013.
- [52] L. Tao, E. Cinquanta, D. Chiappe, C. Grazianetti, M. Fanciulli, M. Dubey, A. Molle, and D. Akinwande, "Silicene field-effect transistors operating at room temperature," *Nature Nanotechnology*, vol. 10, p. 227, 2015.
- [53] B. Lalmi, H. Oughaddou, H. Henriquez, A. Kara, S. Vizzini, B. Ealet, and B. Aufray, "Epitaxial growth of silicene sheet," *Applied Physics Letters*, vol. 97, p. 223109, 2010.
- [54] A. Sanne, S. Park, R. Ghosh, M. N. Yogeesh, C. Liu, L. Mathew, R. Rao, D. Akinwande, and S. K. Banerjee, "Embedded gate cvd  $\text{mos}_2$  microwave fets," *2D Materials and Applications*, vol. 1, p. 26, 2017.
- [55] W. Zhu, S. Park, M. N. Yogeesh, and D. Akinwande, "Advancements in 2d flexible nanoelectronics : from material perspectives to rf applications," *Flexible and Printed Electronics*, vol. 2, p. 043001, 2017.

- 
- [56] S. K. Ameri, R. Ho, H. Jang, L. Tao, Y. Wang, L. Wang, D. M. Schnyer, D. Akinwande, and N. Lu, “Graphene electronic tattoo sensors,” *ACS Nano*, vol. 11, no. 8, p. 7634, 2017.
- [57] M. Katsnelson, K. Novoselov, and A. Geim, “Chiral tunnelling and klein paradox in graphene,” *Nature Physics*, vol. 2, p. 620, 2006.
- [58] H. C. Nguyen and V. L. Nguyen, “Tunneling of dirac electrons through one-dimensional potentials in graphene : a t-matrix approach,” *Journal of Physics : Condensed Matter*, vol. 21, p. 045305, 2009.
- [59] N. M. R. Peres, “The transport properties of graphene,” *Journal of Physics : Condensed Matter*, vol. 21, p. 323201, 2009.
- [60] A. Calogeracos, “Relativistic quantum mechanics : Paradox in a pencil,” *Nature Physics*, vol. 2, p. 579, 2006.
- [61] M. I. Katsnelson and K. S. Novoselov, “Graphene : New bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics,” *Solid State Communications*, vol. 143, no. 1-2, p. 3, 2007.
- [62] C. W. J. Beenakker, “Colloquium : Andreev reflection and klein tunneling in graphene,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 80, p. 1337, 2008.
- [63] N. Stander, B. Huard, and D. Goldhaber-Gordon, “Evidence for klein tunneling in graphene p-n junctions,” *Physical Review Letters*, vol. 102, p. 026807, 2009.
- [64] D. Dragoman, “Evidence against klein paradox in graphene,” *Physica Scripta*, vol. 79, p. 015003, 2009.
- [65] S. Adam, E. Hwang, V. M. Galitski, and S. D. Sarma, “A self-consistent theory of graphene transport,” *PNAS*, vol. 104, p. 18392, 2007.
- [66] J. M. P. Jr., P. Vasilopoulos, and F. M. Peeters, “Graphene-based resonant-tunneling structures,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 90, p. 132122, 2007.
- [67] R. Biswas, S. Mukhopadhyay, and C. Sinha, “Biased driven resonant tunneling through a double barrier graphene based structure,” *Physica E : Low-dimensional systems and nanostructures*, vol. 42, p. 1781, 2010.
- [68] C. Bai, Y. Yang, and X. Zhang, “Klein paradox in the graphene-based double-barrier structures : A real-space green function study,” *Physica E : Low-dimensional systems and nanostructures*, vol. 42, p. 1431, 2010.

- 
- [69] S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge University Press, 1995.
- [70] J. H. Davies, *The physics of low-dimensional semiconductors*. Cambridge University Press, 1998.
- [71] J. D. Lejarreta, C. H. Fuentevilla, E. Diez, and J. M. Cerveró, “An exact transmission coefficient with one and two barriers in graphene,” *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical*, vol. 46, no. 15, p. 155304, 2013.
- [72] P. Harrison, *Quantum wells, wires and dots*. Wiley-Interscience, 2005.
- [73] J. R. F. Lima, “Controlling the energy gap of graphene by fermi velocity engineering,” *Phys. Lett. A*, vol. 379, p. 179, 2015.
- [74] J. M. P. Jr., P. Vasilopoulos, and F. M. Peeters, “Resonant tunneling in graphene microstructures,” *Microelectronics Journal*, vol. 39, p. 534, 2008.
- [75] R. Landauer, “Electrical transport in open and closed systems,” *Z. Phys. B - Condensed Matter*, vol. 68, no. 2, p. 217, 1987.
- [76] S. Datta, *Quantum transport : atom to transistor*. Cambridge University Press, 2005.
- [77] S. Datta, *Lessons from nanoelectronics. A new perspective on transport*. World Scientific, 2012.
- [78] T. Ando, “The electronic properties of graphene and carbon nanotubes,” *NPG Asia Mater.*, vol. 1, no. 1, p. 17, 2009.
- [79] S. L. Chuang, *Physics of optoelectronic devices*. Wiley Interscience, 1995.
- [80] C. Cobaleda, S. Pezzini, E. Diez, and V. Bellani, “Temperature- and density-dependent transport regimes in a h-bn/bilayer graphene/h-bn heterostructure,” *Phys. Rev. B*, vol. 89, p. 121404(R), 2014.
- [81] M. C. Lemme, “Current status of graphene transistors,” *Solid State Phenomena*, vol. 156-158, p. 499, 2010.
- [82] B. Huard, J. A. Sulpizio, N. Stander, K. Todd, B. Yang, and D. Goldhaber-Gordon, “Transport measurements across a tunable potential barrier in graphene,” *Physical Review Letters*, vol. 98, no. 23, p. 236803, 2007.

- 
- [83] S. Morozov, K. Novoselov, M. Katsnelson, F. Schedin, D. Elias, J. Jaszczak, and A. Geim, “Giant intrinsic carrier mobilities in graphene and its bilayer,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 100, p. 016602, 2008.
- [84] J. M. Cerveró and E. Diez, “The massless dirac equation in the refrigerator,” *International Journal of Theoretical Physics*, vol. 50, no. 7, p. 2134, 2011.
- [85] A. Calogeracos and N. Dombey, “History and physics of the klein paradox,” *Contemporary Physics Review*, vol. 40, no. 5, p. 313, 1999.
- [86] C. H. Fuentevilla, J. D. Lejarreta, C. Cobaleda, and E. Diez, “Angle dependent conductivity in graphene fet transistors,” *Solid-State Electronics*, vol. 104, p. 47, 2015.
- [87] T. Low and J. Appenzeller, “Electronic transport properties of a tilted graphene p-n junction,” *Physical Review B*, vol. 80, no. 15, p. 155406, 2009.
- [88] M. Kim, J.-H. Choi, S.-H. Lee, K. Watanabe, T. Taniguchi, S.-H. Jhi, and H.-J. Lee, “Valley-symmetry-preserved transport in ballistic graphene with gate-defined carrier guiding,” *Nature Physics*, vol. 12, p. 1022, 2016.
- [89] X.-W. Liu and A. P. Stamp, “Resonance splitting effect in multibarrier tunneling,” *Physical Review B*, vol. 47, no. 24, p. 16605, 1993.
- [90] X.-W. Liu and A. P. Stamp, “Resonant tunneling and resonance splitting : The inherent properties of superlattices,” *Physical Review B*, vol. 50, no. 3, p. 1588, 1994.
- [91] A. Zubarev and D. Dragoman, “Applications of multi-barrier structures in graphene,” *Physica E*, vol. 44, p. 1687, 2012.
- [92] Y. Xu, Y. He, and Y. Yang, “Resonant peak splitting in graphene superlattices with one-dimensional periodic potentials,” *Appl. Phys. A*, vol. 115, p. 721, 2014.
- [93] J. M. P. Jr., F. M. Peeters, A. Chaves, and G. A. Farias, “Klein tunneling in single and multiple barriers in graphene,” *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 25, p. 033002, 2010.
- [94] E. Santos, *Exotic properties of carbon nanomatter. Advances in Physics and Chemistry*. M.V. Putz and O. Ori., 2005.

- 
- [95] W. Yansen, M. Abdullah, and Khairurrijal, "Application of airy function approach to model electron tunneling in graphene nanoribbon-based p-n junction diodes," *Jurnal Nanosains and Nanoteknologi*, vol. 3, no. 1, p. 18, 2010.
- [96] M. L. Glasser and N. Shawagfeh, "Dirac equation for a linear potential," *Journal of Mathematical Physics*, vol. 25, p. 2533, 1984.
- [97] J. R. Hiller, "Solution of the one-dimensional dirac equation with a linear scalar potential," *American Journal of Physics*, vol. 70, p. 522, 2002.
- [98] R.-K. Su and Y. Zhang, "Exact solutions of the dirac equation with a linear scalar confining potential in a uniform electric field," *J. Phys. A : Math. Gen.*, vol. 17, p. 851, 1984.
- [99] C.-Y. Long and S.-J. Qin, "Exact solution to the one-dimensional dirac equation of linear potential," *Chinese Physics*, vol. 16, p. 897, 2007.
- [100] X. Yan, Z.-J. Hu, W.-H. Ding, X.-L. Lu, and H. Xie, "One-dimensional method of investigating the localized states in armchair graphene-like nanoribbons with defects," *Chin. Phys. Lett.*, vol. 30, p. 047202, 2013.
- [101] X. Xu, G. Xu, and J. Cao, "Electron tunneling through a trapezoidal barrier in graphene," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 49, p. 085201, 2010.
- [102] A. E. Mouhafid and A. Jellal, "Transport properties for triangular barriers in graphene nanoribbon," *Journal of Low Temperature Physics*, vol. 173, p. 264, 2013.
- [103] J. Munárriz, C. Gaul, A. V. Malyshev, P. A. Orellana, C. A. Müller, and F. Domínguez-Adame, "Strong spin-dependent negative differential resistance in composite graphene superlattices," *Phys. Rev. B*, vol. 88, p. 155423, 2013.
- [104] H. Bahlouli, E. B. Choubabi, A. E. Mouhafid, and A. Jellal, "Transmission through biased graphene strip," *Solid State Communications*, vol. 151, p. 1309, 2011.
- [105] X. Zhang, B.-Z. Li, G. Sun, and F.-C. Pu., "Spin-polarized tunneling and magnetoresistance in ferromagnet/insulator(semiconductor) single and double tunnel junctions subjected to an electric field," *Phys. Rev. B*, vol. 56, p. 5484, 1997.

- 
- [106] C. Dean, A. Young, I. Meric, C. Lee, L. Wang, S. Sorgenfrei, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Kim, K. Shepard, and J. Hone, “Boron nitride substrates for high-quality graphene electronics,” *Nature Nanotech.*, vol. 5, p. 722, 2010.
- [107] Y.-W. Son, M. Cohen, and S. Louie, “Energy gaps in graphene nanoribbons,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 97, p. 216803, 2006.
- [108] V. Barone, . Hod, and G. Scuseria, “Electronic structure and stability of semiconducting graphene nanoribbons,” *Nano Lett.*, vol. 6, no. 12, p. 2748, 2006.
- [109] L. Brey and H. A. Fertig, “Electronic states in graphene nanoribbons studied with the dirac equation,” *Physical Review B*, vol. 73, p. 235411, 2006.
- [110] F. Ma, Z. Guo, K. Xu, and P. Chu, “First-principle study of energy band structure of armchair graphene nanoribbons,” *Solid State Communications*, vol. 152, no. 13, p. 1089, 2012.
- [111] G. J. Xu, Y. M. Zhu, B. H. Wu, X. G. Xu, and J. C. Cao, “Impact of induced bandgaps on sub-poissonian shot noise in graphene armchair-edge nanoribbons,” *Journal of Applied Physics*, vol. 112, p. 073716, 2012.
- [112] Y.-M. Lin, V. Parebeinos, Z. Chen, and P. Avouris, “Electrical observation of subband formation in graphene nanoribbons,” *Phys. Rev. B*, vol. 78, p. 161409(R), 2008.
- [113] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. Dresselhaus, “Edge state in graphene ribbons : Nanometer size effect and edge shape dependence,” *Physical Review B*, vol. 54, no. 24, p. 17954, 1996.
- [114] D. Kosynkin, A. Higginbotham, A. Sinitskii, J. Lomeda, A. Dimiev, B. Price, and J. Tour, “Longitudinal unzipping of carbon nanotubes to form graphene nanoribbons,” *Nature*, vol. 458, p. 872.
- [115] L. Jiao, L. Zhang, X. Wang, G. Diankov, and H. Dai, “Narrow graphene nanoribbons from carbon nanotubes,” *Nature*, vol. 458, p. 877, 2009.
- [116] J. Cai, P. Ruffieux, R. Jaafar, M. Bieri, T. Braun, S. Blankenburg, M. Muoth, A. Seitsonen, M. Saleh, X. Feng, K. Müllen, and R. Fasel, “Atomically precise bottom-up fabrication of graphene nanoribbons,” *Nature*, vol. 466, p. 470, 2010.

- 
- [117] H. Huang, D. Wei, J. Sun, S. Wong, Y. Feng, A. C. Neto, and A. Wee, “Spatially resolved electronic structures of atomically precise armchair graphene nanoribbons,” *Scientific Reports*, vol. 2, p. 983, 2012.
- [118] L. Talirz, H. Söde, J. Cai, P. Ruffieux, S. Blakenburg, R. Jafaar, R. Berger, X. Feng, K. Müllen, D. Passerone, R. Fasel, and C. Pignedoli, “Termini of bottom-up fabricated graphene nanoribbons,” *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 135, no. 6, p. 2060, 2013.
- [119] W. Xu and T.-W. Lee, “Recent progress in fabrication techniques of graphene nanoribbons,” *Mater. Horiz.*, vol. 3, p. 186, 2016.
- [120] J. A. Torres, J. I. Pascual, and J. J. Sáenz, “Theory of conduction through narrow constrictions in a three-dimensional electron gas,” *Physical Review B*, vol. 49, no. 23, p. 16581, 1994.
- [121] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon, “Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 60, p. 848, 1988.
- [122] D. A. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost, D. G. Hasko, D. C. Peacock, D. A. Ritchie, and G. A. C. Jones, “One-dimensional transport and the quantisation of the ballistic resistance,” *Journal of Physics C : Solid State Physics*, vol. 21, no. 8, p. L209, 1988.
- [123] D. A. Wharam, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost, D. G. Hasko, D. C. Peacock, D. A. Ritchie, and G. A. C. Jones, “Addition of the one-dimensional quantised ballistic resistance,” *Journal of Physics C : Solid State Physics*, vol. 21, no. 8, p. L887, 1988.
- [124] H. van Houten and C. W. J. Beenakker, “Quantum point contacts,” *Physics Today*, vol. 49, no. 7, p. 22, 1996.
- [125] L. I. Glazman, G. B. Lesovik, D. E. Khmelnitskii, and R. I. Shekhter, “Reflectionless quantum transport and fundamental ballistic-resistance steps in microscopic constrictions,” *JETP Letters*, vol. 48, no. 4, p. 238, 1988.
- [126] A. Szafer and A. D. Stone, “Theory of quantum conduction through a constriction,” *Physical Review Letters*, vol. 62, no. 3, p. 300, 1989.

- 
- [127] F. Muñoz-Rojas, D. Jacob, J. Fernández-Rossier, and J. Palacios, “Coherent transport in graphene nanoconstrictions,” *Physical Review B*, vol. 74, p. 195417, 2006.
- [128] P. Darancet, V. Olevano, and D. Mayou, “Coherent electronic transport through graphene constrictions : subwavelength regime and optical analogy,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 102, no. 13, p. 136803, 2009.
- [129] H. Q. Yin, W. Li, X. Hu, and R. Tao, “Coherent transport of armchair graphene constrictions,” *Journal of Applied Physics*, vol. 107, p. 103706, 2010.
- [130] H. Li, L. Wang, Z. Lan, and Y. Zheng, “Generalized transfer matrix theory of electronic transport through a graphene waveguide,” *Phys. Rev. B*, vol. 79, p. 155429, 2009.
- [131] C. Yannouleas, I. Romanovsky, and U. Landman, “Interplay of relativistic and nonrelativistic transport in atomically precise segmented graphene nanoribbons,” *Scientific Reports*, vol. 5, p. 7893, 2015.
- [132] B. Özyilmaz, P. Jarrillo-Herrero, D. Efetov, and P. Kim, “Electronic transport in locally gated graphene nanoconstrictions,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 91, p. 192107, 2007.
- [133] K. Todd, H.-T. Chou, S. Amasha, and D. Goldhaber-Gordon, “Quantum dot behavior in graphene nanoconstrictions,” *Nano Letters*, vol. 9, no. 1, p. 416, 2009.
- [134] N. Tombros, A. Veligura, J. Junesch, M. H. D. Guimaraes, I. J. Vera-Marun, H. T. Jonkman, and B. J. van Wees, “Quantized conductance of a suspended graphene nanoconstriction,” *Nature Physics*, vol. 7, p. 697, 2011.
- [135] B. Terrés, L. Chizhova, F. Libisch, J. Peiro, D. Jörger, S. Engels, A. Girschik, K. Watanabe, T. Taniguchi, S. V. Rotkin, J. Burgdörfer, and C. Stampfer, “Size quantization of dirac fermions in graphene constrictions,” *Nature Communications*, vol. 7, p. 11528, 2016.
- [136] J. Baringhaus, M. Settnes, J. Aprojanz, S. R. Power, A.-P. Jauho, and C. Tegenkamp, “Electron interference in ballistic graphene nanoconstrictions,” *Physical Review Letters*, vol. 116, p. 186602, 2016.
- [137] P. Gehring, H. Sadeghi, S. Sangtarash, C. S. Lau, J. Liu, A. Ardavan, J. H. Warner, C. J. Lambert, G. Andrew, D. Briggs, and J. A. Mol,

- 
- “Quantum interference in graphene nanoconstrictions,” *Nano Letters*, vol. 16, p. 4210, 2016.
- [138] R. K. Kumar, D. A. Bandurin, F. M. D. Pellegrino, Y. Cao, A. Principi, H. Guo, G. H. Auton, M. B. Shalom, L. A. Ponomarenko, G. Falkovich, K. Watanabe, T. Taniguchi, I. V. Grigorieva, L. S. Levitov, M. Polini, and A. Geim, “Superballistic flow of viscous electron fluid through graphene constrictions,” *Nature Physics*, vol. 13, p. 1182, 2017.
- [139] M. Arai, S. Masubuchi, K. Nose, Y. Mitsuda, and T. Machida, “Fabrication of 10-nm-scale nanoconstrictions in graphene using atomic force microscopy-based local anodic oxidation lithography,” *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 54, p. 04DJ06, 2015.
- [140] A. Chuvilin, J. C. Meyer, G. Algara-Siller, and U. Kaiser, “From graphene constrictions to single carbon chains,” *New Journal of Physics*, vol. 11, p. 083019, 2009.
- [141] O. Cretu, A. R. Botello-Méndez, I. Janowska, C. Pham-Huu, J.-C. Charlier, and F. Banhart, “Electrical transport measured in atomic carbon chains,” *Nano Letters*, vol. 13, p. 3487, 2013.
- [142] J.-H. Hur and D.-K. Kim, “Theoretical investigation of performance of armchair graphene nanoribbon field effect transistors,” *Nanotechnology*, vol. 29, p. 185202, 2018.
- [143] J. Wurm, M. Wimmer, I. Adagideli, K. Richter, and H. U. Baranger, “Interfaces within graphene nanoribbons,” *New Journal of Physics*, vol. 11, p. 095022, 2009.
- [144] M. Guimaraes, O. Svevtsov, X. Waintal, and B. van Wees, “From quantum confinement to quantum hall effect in graphene nanostructures,” *Physical Review B*, vol. 85, p. 075424, 2012.
- [145] A. Mrenca-Kolasinska and B. Szafran, “Imaging backscattering in graphene quantum point contacts,” *Phys. Rev. B*, vol. 96, p. 165310, 2017.
- [146] V. Clericò, J. Delgado-Notario, M. Saiz-Bretín, C. Fuentevilla, A. Malyshev, J. Lejarreta, E. Diez, and F. Domínguez-Adame, “Quantized electron transport through graphene nanoconstrictions,” *Phys. Status Solidi A*, vol. 215, no. 19, p. 1701065, 2018.
- [147] V. Clericò, J. Delgado-Notario, M. Saiz-Bretín, A. Malyshev, Y. Mezziani, P. Hidalgo, B. Méndez, M. Amado, F. Domínguez-Adame, and

- 
- E. Diez, “Quantum nanoconstrictions fabricated by cryo-etching in encapsulated graphene,” *Scientific Reports*, vol. 9, p. 13572, 2019.
- [148] T. Fang, A. Konar, H. Xing, and D. Jena, “Carrier statistics and quantum capacitance of graphene sheets and ribbons,” *Applied Physics Letters*, vol. 91, p. 092109, 2007.
- [149] M. Lundstrom and C. Jeong, *Lessons from nanoscience : A lecture note series - Vol.2 Near-equilibrium transport. Fundamentals and applications*. World Scientific, 2013.