



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS  
Centro de Investigación en Ciencias

Nano resonadores de grafeno para valletrónica

**TESIS**

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE  
**DOCTOR EN CIENCIAS**

PRESENTA

WALTER SIGFRIDO ORTIZ GUERRERO

DIRECTOR DE TESIS

Dr. Thomas Stegmann

CUERNAVACA, MORELOS

Diciembre, 2022

# Índice general

<b>Índice general</b>	<b>II</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>IV</b>
<b>Resumen</b>	<b>VI</b>
<b>1 Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2 Configuración estructural del grafeno</b>	<b>5</b>
<b>3 Nano resonador</b>	<b>9</b>
<b>4 Modelo discreto</b>	<b>13</b>
4.1 Hamiltoniano de amarre fuerte . . . . .	13
4.1.1 Estructura electrónica de bandas del grafeno . . . . .	14
<b>5 Modelo continuo</b>	<b>17</b>
5.1 Líneas de corriente . . . . .	18
5.2 Estrés maximo . . . . .	20
<b>6 Modelos para nano dispositivos</b>	<b>21</b>
6.1 Matriz de densidad y función espectral . . . . .	22
6.2 Formalismo de funciones de Green . . . . .	23
6.2.1 Matriz de ensanchamiento . . . . .	25
6.3 Sistema fuera del equilibrio . . . . .	25
6.3.1 Flujo de corriente . . . . .	27
6.3.2 Función de Green para el nano resonador . . . . .	28
6.3.3 Contactos de onda plana . . . . .	29

6.3.4	Contactos de banda ancha . . . . .	30
6.4	Polarización de valle . . . . .	30
<b>7</b>	<b>Nano resonadores con inyeccion en borde armchair</b>	<b>33</b>
7.1	Nano resonadores de grafeno circulares . . . . .	34
7.1.1	Inyección en onda plana . . . . .	38
7.1.2	Inyección en banda ancha . . . . .	41
7.2	Nano resonadores de grafeno rectangulares . . . . .	44
7.2.1	Inyección en onda plana . . . . .	45
7.2.2	Inyección en banda ancha . . . . .	48
<b>8</b>	<b>Nano resonadores con inyeccion en borde zigzag</b>	<b>51</b>
8.1	Nano resonadores de grafeno circulares . . . . .	52
8.2	Inyección en onda plana . . . . .	52
8.3	Nano resonadores de grafeno rectangulares . . . . .	54
8.3.1	Inyección en onda plana . . . . .	54
<b>9</b>	<b>Otros resultados</b>	<b>59</b>
9.1	Asimetrías . . . . .	59
9.2	Nano resonadores en serie . . . . .	61
9.3	Efecto del campo pseudo eléctrico . . . . .	61
<b>10</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>63</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>A</b>

# Agradecimientos

Gran parte de lo que logramos y lo que nos forma es gracias al apoyo y el amor de las personas a las que les importamos. Agradezco tener cerca de mi personas que me apoyen y me amen, su presencia me ha permitido avanzar hasta donde he llegado. Agradezco la felicidad que me brindan mi esposa Bryone y mi hijo Dante. Para este trabajo, agradezco principalmente a mi tutor el Dr. Thomas Stegmann, por todo lo que me enseñó, desde conocimientos fundamentales para realizar mi investigación hasta detalles técnicos, agradezco que compartiera su experiencia para lograr la publicación del artículo de investigación que surgió como fruto de mi doctorado. Agradezco su gran apoyo en general a lo largo de estos cuatro años. Gracias a todos los profesores que leyeron esta tesis y me ayudaron a mejorarla, sobre todo a los que formaron parte de mi comité tutorial y que aportaron valiosos comentarios, sugerencias. A la Universidad Autónoma del Estado de Morelos y a las personas que forman parte del Posgrado en Ciencias del Instituto de Investigaciones en Ciencias Básicas y Aplicadas, donde realicé mi Doctorado en Ciencias en el área de física. Gracias al Instituto de Ciencias Físicas de la UNAM, donde me brindaron un espacio para realizar esta tesis. Igual de importante es agradecer a CONACyT por apoyar este trabajo al concederme la beca de Doctorado del Programa Nacional de Posgrados de Calidad (PNPC) y a los proyectos UNAM-PAPIIT IN103922 y Conacyt Ciencia Básica A1-S-13469. Gracias a todos.

# Resumen

El avance de la electrónica y los dispositivos electrónicos en los últimos años ha incrementado de forma impresionante. Diferentes y nuevos enfoques han sido abordados con el objetivo de solucionar problemas y mejorar diferentes aspectos de las tecnologías ya existentes. La espintrónica por ejemplo, surgió del estudio de diferentes fenómenos de transporte de electrones dependientes del espín que con el tiempo llevaron a la propuesta y desarrollo de dispositivos electrónicos que usan este tipo de fenómenos como los Spin Field-Effect Transistor, Spin-Transfer Torque RAM, diodos de spin, entre otros. Para este estudio es relevante la valletrónica, que utiliza el espín de valle. Este es un nuevo grado de libertad que presentan los electrones en grafeno prístino. Esta propiedad abre la posibilidad de generar corrientes de electrones polarizadas en dos estados, denominados  $\mathbf{K}^+$  y  $\mathbf{K}^-$ . Existen diferentes formas de polarizar una corriente de electrones que fluye en una cinta de grafeno. Su eficiencia, utilidad y otras cualidades son temas actuales de estudio. En este trabajo se presenta el estudio de un nano resonador diseñado para funcionar como polarizador de valle. este dispositivo consta de una membrana que se coloca sobre un sustrato y se ajusta en los bordes mediante una fotorresistencia. Las vibraciones mecánicas generadas por el nano resonador provocan deformaciones en la membrana, que a su vez, generan un campo pseudo magnético en la cinta de grafeno. Este campo interactúa con la corriente de electrones, teniendo en cuenta el espín de valle, lo que induce la generación de corrientes polarizadas. Diferentes modos de vibración en membranas circulares y rectangulares fueron estudiados para determinar la eficiencia del dispositivo. Se estudiaron dos formas teóricas de inyectar los electrones en el sistema que representan dos situaciones experimentales opuestas, por un lado un haz coherente y por el otro un haz completamente disperso.

Se determinó que el sistema propuesto puede ser utilizado como un polarizador de valle muy eficiente y robusto para ciertos valores de la energía de los electrones y el estrés en la cinta de grafeno. Una característica interesante del dispositivo es que los resultados presentados fueron obtenidos para valores del estrés de la cinta menores al 1%. Valores muy bajos para el estrés hacen accesible la realización y funcionamiento del dispositivo en la práctica.

El grafeno es un material bidimensional con propiedades novedosas, ampliamente conocidas que ya han sido revisadas en trabajos anteriores [1, 2, 16] . Desde su descubrimiento en 2004 [54] se abrió la posibilidad a una gran cantidad de aplicaciones en diferentes áreas, desde membranas de separación, foto detectores, electrónica basada en grafeno, dispositivos para almacenar energía e incluso aplicaciones biomédicas o acústicas [15, 58, 67]. En los últimos años se ha encauzado una línea de investigación hacia un tipo de electrónica basado en un nuevo grado de libertad del grafeno, llamado espín de valle [55]. El espín de valle surge debido a la estructura de la red y abre la posibilidad de generar haces de electrones polarizados. Diferentes propuestas se han hecho para estudiar varios aspectos de la polarización de espín de valle con el objetivo de avanzar hacia el desarrollo de dispositivos basados en la electrónica de valle [9, 10, 32, 38, 42, 43, 57, 62, 64, 66, 70]. Algunos de estos estudios utilizan campos pseudo magnéticos que surgen al deformar una cinta de grafeno [9, 42, 57, 64, 70]. La mayor parte de los trabajos anteriores se han centrado en el estudio de deformaciones gaussianas de la cinta de grafeno [42, 63-65, 70]. Actualmente los porcentajes de estrés empleados para deformar una cinta de grafeno presentan limitaciones experimentales y los sistemas estudiados no suelen pasar los 100 nm. Experimentalmente se suele tratar con sistemas en el orden de  $\mu m$ . Para que los dispositivos basados en la electrónica de valle sean una realidad, aún es necesario un desarrollo más fino del conocimiento detrás de esta tecnología. Importantes trabajos anteriores a este han propuesto formas de crear y manipular corrientes polarizadas [6, 7, 32, 43, 50, 62, 65, 66]. En esta tesis se presenta la propuesta de un dispositivo que permite controlar el flujo de electrones por medio de un campo pseudo magnético que se origina al deformar una cinta de grafeno. Se emplearon dos tipos de deformaciones. Los

campos pseudo magnéticos asociados a cada deformación modifican las trayectorias de los electrones de acuerdo con su espín de valle. El sistema se estudió teóricamente comparando los resultados de un modelo discreto de amarre fuerte que se empleó para calcular la densidad de corriente y un modelo continuo con el que se calcularon las trayectorias semiclásicas de los electrones. En el modelo discreto se estudian principalmente dos formas de inyectar los electrones en el sistema que representan dos situaciones experimentales, en la primera los electrones son inyectados de modo que fluyen en una dirección perfectamente definida y en la segunda la corriente de electrones es completamente dispersa. El principal objetivo del trabajo es aportar bases teóricas que permitan el desarrollo de dispositivos para la polarización de haces de electrones de acuerdo con su espín de valle. Mostramos que el dispositivo propuesto puede ser usado para construir polarizadores de espín de valle robustos y eficientes. Se presentan algunas aplicaciones para el espín de valle que podrían ayudar al desarrollo de la valletrónica. Los siguientes resultados son principalmente importantes, para sistemas donde el flujo de corriente es inyectado perfectamente. En este caso los haces de electrones son divididos en tres haces bien definidos y con una muy buena polarización. Cuando la corriente está totalmente dispersa aún es posible obtener haces polarizados aunque en ese caso la eficiencia de la polarización disminuye. Por último se muestra que se puede obtener un haz de electrones bien definido a partir de un haz completamente disperso utilizando nano resonadores en serie. La tesis está estructurada de la siguiente manera. En el capítulo 2 se da una descripción de la configuración electrónica y estructural de una cinta de grafeno como base para la construcción del Hamiltoniano de que describe el sistema. En el capítulo 3 se describe el sistema propuesto para el estudio de la polarización de valle. En el capítulo 4 se desarrolla el modelo discreto para la cinta de grafeno. En el capítulo 5 se presenta el modelo semiclásico para las trayectorias que siguen los electrones en la cinta de grafeno. En el capítulo 6 se da una breve presentación de los conceptos necesarios para el cálculo de la corriente en un nanodispositivo dentro del formalismo de funciones de Green. También se describen los modelos usados para los contactos y se explica la medición de la polarización de valle. En los capítulos 7 y 8 se presenta el estudio de la densidad de corriente y la polarización para ambos tipos de bordes armchair y zigzag empleando los dos modelos de inyección banda ancha e inyección de onda plana. En el capítulo 9 se presentan otros resultados interesantes y fenómenos relevantes al estudio de la corriente. Por último se presentan las conclusiones del



CAPÍTULO

# 2

## Configuración estructural del grafeno

El carbono es un elemento muy abundante en la naturaleza, es la base de toda una rama de la química y por esto forma parte de una gran cantidad de moléculas llamadas moléculas orgánicas. Está compuesto por 6 electrones, 6 protones y 6 neutrones para el carbono 12. Su configuración electrónica es de la siguiente manera, 2 electrones están en el orbital más cercano al núcleo  $1s$ , otro par de electrones está en el orbital  $2s$  y los dos últimos en los orbitales  $2p$  ( $2p_x$ ,  $2p_y$  y  $2p_z$ ). En el estado base los electrones no pasan a los orbitales  $2p$  ya que hay una brecha energética de  $4eV$  entre  $2s$  y  $2p$ . Sin embargo cuando un átomo de carbono se encuentra cerca de otro átomo de carbono o alguno otro como hidrógeno u oxígeno es posible excitar un electrón del orbital  $2s$  a uno de los orbitales  $2p_x$ ,  $2p_y$  o  $2p_z$  formando con dicho átomo un enlace covalente llamado enlace sigma [25].

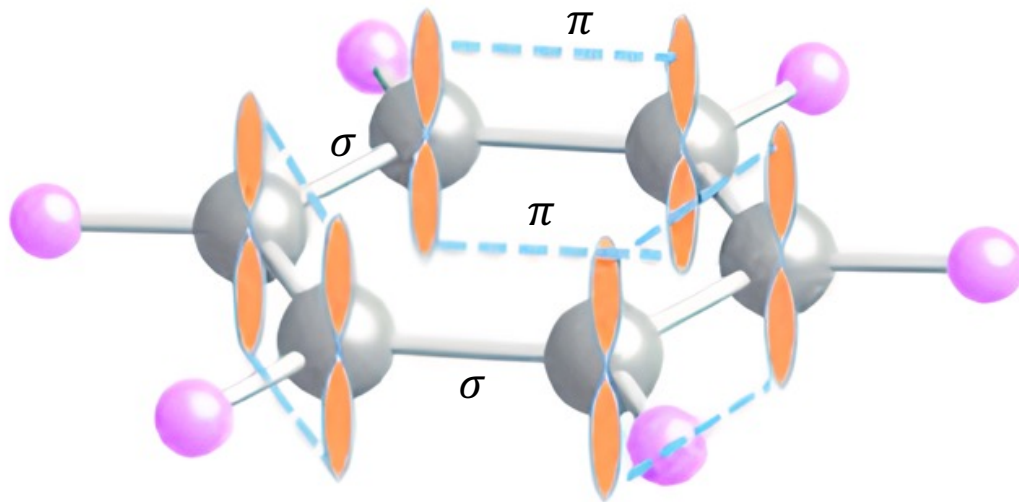


Figura 2.1: Configuración electrónica del grafeno. Se muestran los orbitales  $sp^2$  orientados en el plano  $xy$  formando enlaces  $\sigma$ , en color gris que por el ángulo entre ellos permiten la formación de los anillos de benceno a lo largo de la red. En naranja se muestran los orbitales  $p_z$  que forman los enlaces  $\pi$  y que a su vez forman las bandas  $\pi$  de conducción y valencia

Se puede hacer la superposición de cuatro estados mecano-cuánticos equivalentes, a esto se le llama hibridación  $sp^n$  que es muy importante para la formación de enlaces covalentes de carbono. Cuando se superpone el orbital  $2s$  con los dos orbitales  $2p$ ,  $2p_x$  y  $2p_y$  se obtienen tres orbitales híbridos  $sp^2$  orientados en el plano  $xy$  con una separación angular de  $120^\circ$ , el orbital sobrante no híbrido  $p_z$  es perpendicular al plano, como se muestra en la Figura 2.1. A partir de este tipo de hibridación de los orbitales se forma la molécula de benceno, un anillo hexagonal con átomos de carbono en sus esquinas unidos por enlaces sigma que tienen una longitud de 0.142 nm. Una cinta de grafeno se puede ver como un mosaico de anillos (hexágonos) de benceno parecida a un panal [25]. En esta estructura queda un electrón libre por cada átomo de carbono en la red, estos electrones en los orbitales  $sp_z$  interactúan formando enlaces  $\pi$ , el conjunto de estos orbitales da lugar a la banda  $\pi$  de electrones deslocalizados. La red de grafeno se puede pensar cómo dos subredes de Bravais triangulares. Una celda unitaria compone la unidad más pequeña de cada red y se construye a partir de los siguientes vectores  $\mathbf{a}_1$  y  $\mathbf{a}_2$  definidos como:

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}) \quad \text{y} \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}). \quad (2.1)$$

De acuerdo con esta definición, dentro de una celda unitaria se encuentra un átomo A que

pertenece a una de las subredes y un átomo B que pertenece a la otra, los átomos de ambas subredes A y B están conectados por los vectores:

$$\delta_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y), \quad \delta_2 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y), \quad \delta_3 = -a\mathbf{e}_y. \quad (2.2)$$

Cada átomo A está conectado a tres átomos B y cada átomo B está conectado a tres átomos A. En la Figura 2.2(a) se aprecia cómo a partir de los vectores  $\mathbf{a}_1$  y  $\mathbf{a}_2$  se forma la red de grafeno.

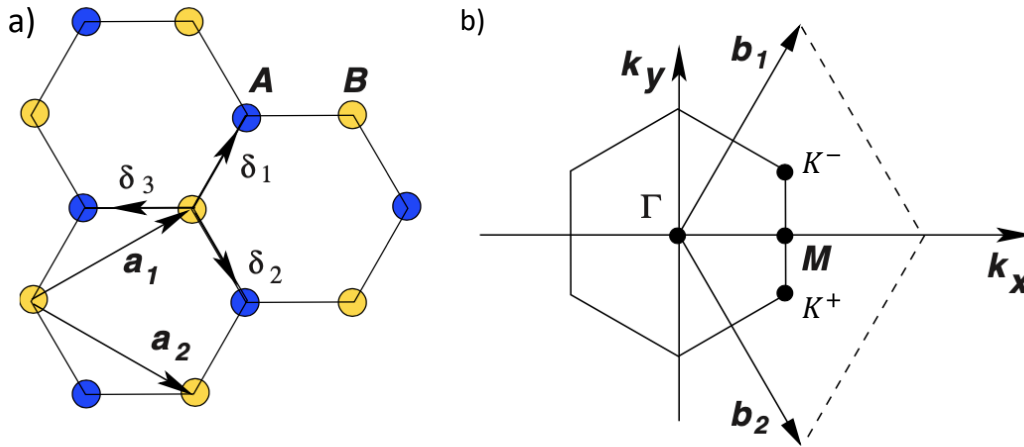


Figura 2.2: Configuración estructural del grafeno. Del lado derecho se muestran los átomos de una subred en amarillo y de la otra en azul, los enlaces se muestran en negro. Se muestran también los vectores  $\mathbf{a}_1$  y  $\mathbf{a}_2$  que forman las celdas unitarias que forman toda la red. Del lado izquierdo se muestra la zona de Brillouin en el espacio recíproco. Imagen modificada de [46]

En el espacio recíproco los vectores base están dados por:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}) \quad \text{y} \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}). \quad (2.3)$$

y forman en el espacio recíproco la celda unitaria llamada zona de Brillouin ver Figura 2.2 (b).

En este capítulo se describe la configuración de un dispositivo teórico que se propone con el objetivo de polarizar y controlar la corriente eléctrica en una cinta de grafeno. En una película rectangular se distinguen dos tipos de bordes denominados armchair y zigzag mostrados en la Figura 3.1 marcando los átomos en azul y rojo respectivamente.

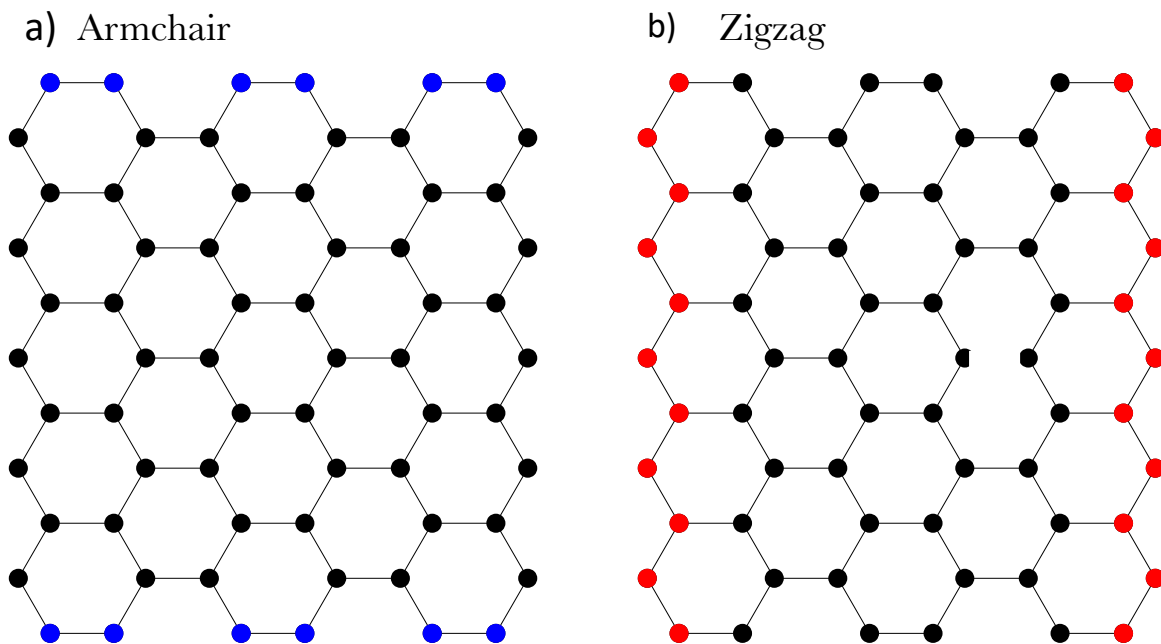


Figura 3.1: (a) Átomos del borde armchair marcados en azul y (b) átomos del borde zigzag marcados en rojo

El sistema está formado por una cinta de  $300 \text{ nm} \times 600 \text{ nm}$  colocada sobre un sustrato aislante con una cavidad, creando una membrana. La membrana se hace vibrar para formar un nano resonador [20, 21]. Dos tipos de membranas fueron consideradas para el estudio, rectan-

gulares y circulares. El contorno de la membrana se fija al sustrato usando una fotoresistencia como se muestra en la Figura 3.2 [13, 33, 34]. El sistema está conectado a dos contactos, uno donde se inyectan electrones y otro donde se colectan luego de atravesar el sistema, se ejerce para deformar la membrana, puede ser generado de diferentes maneras, se puede hacer con la presión de un gas, un campo eléctrico o vibraciones mecánicas. El trabajo desarrollado en esta tesis se centra en el estudio de deformaciones generadas por los modos de vibración clásicos de una membrana (circular o rectangular), esto se obtiene generalmente a partir de vibraciones mecánicas. En ambos casos se asume que el único cambio se da en la altura de los átomos

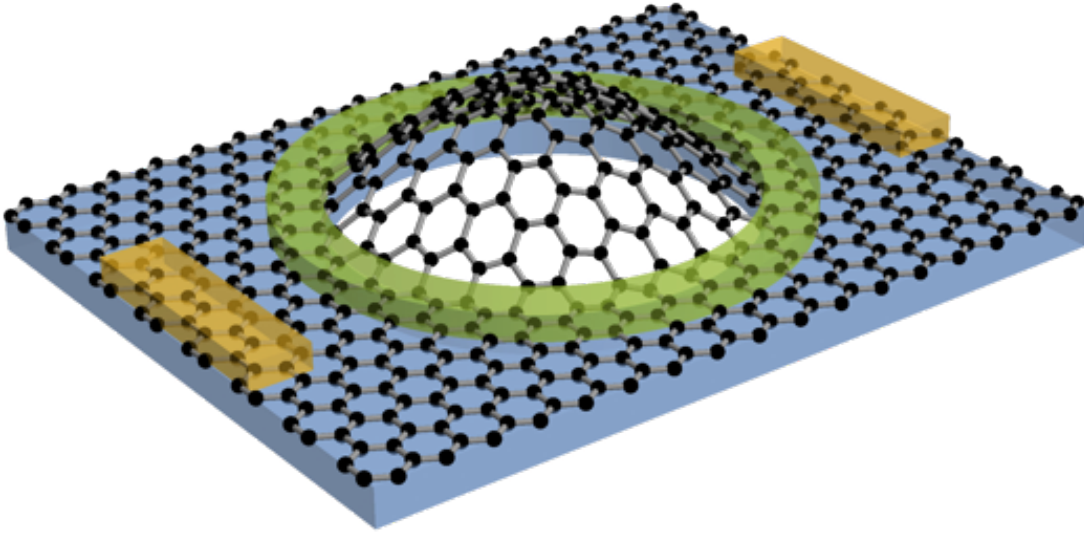


Figura 3.2: Esquema de un nano resonador (circular). Una membrana de grafeno es colocada sobre una placa de sustrato (marcado en azul) con un orificio circular o rectangular, para formar una membrana. Esta membrana se fija por el contorno con una fotoresistencia (marcada en verde) para formar el nano-tambor. La membrana de grafeno es deformada por la presión de un gas, un campo eléctrico o vibraciones mecánicas. La corriente es inyectada y detectada en los bordes del sistema (barras doradas).

de carbono, de acuerdo a las funciones 3.1 y 3.2. Los valores del estrés ejercido no superan el 1% por lo que se pueden despreciar los desplazamientos en el plano que pueda generar la deformación. Para la deformación circular se usan los modos de vibración de un tambor circular, la altura de cada átomo está descrita por la siguiente función:

$$h_{mn}(r, \phi) = \begin{cases} AJ_m(\lambda_{mn}r/r_0) \cos(m\phi) & \text{if } r \leq r_0, \\ 0 & \text{en otros casos.} \end{cases} \quad (3.1)$$

y para deformaciones rectangulares se utilizo la función:

$$h_{mn}(x,y) = \begin{cases} A \sin(nx/L_x) \sin(my/L_y) & \text{if } x,y \in \mathcal{L}, \\ 0 & \text{en otros caso.} \end{cases} \quad (3.2)$$

El parámetro  $a$  en ambas funciones determina la amplitud de la deformación. Los valores de  $n$  y  $m$  determinan los modos de vibración para ambos tipos de deformaciones. El parámetro  $r_0$  determina el radio de la membrana circular,  $J_m$  es la  $m$  ésima función de Bessel de primer clase y  $\lambda_{mn}$  es el  $n$  ésimo cero de  $J_m$ . Para la deformación rectangular  $L_x$  y  $L_y$  son el ancho y el largo de la cinta respectivamente. Las distancias entre átomos aumentan debido al estrés y disminuye la energía de acoplamiento de modo que:

$$t_{ij} \cong t_0 \exp(-\beta \delta_{ij}), \quad (3.3)$$

donde  $\delta_{ij} = \frac{r_i - r_j - a}{a}$  y  $\beta = 3.37$  [10, 51, 53], estas modificaciones determinan la forma del Hamiltoniano que describe la cinta de grafeno deformada y son tomadas en cuenta para el cálculo de las trayectorias semiclásicas en las ecuaciones del modelo continuo.

Los dispositivos electrónicos que utilizan materiales sólidos cristalinos suelen ser estudiados mediante modelos de amarre fuerte que son un enfoque de la física de estado sólido. Comúnmente los modelos de amarre fuerte se utilizan para el cálculo de la estructura de bandas electrónicas. Para estudiar el dispositivo propuesto se requiere de una descripción matemática de la cinta de grafeno. Esta descripción se hace a partir de un Hamiltoniano de amarre fuerte. Tratando la cinta de grafeno como un sólido cristalino, se construye el Hamiltoniano descrito a continuación.

### 4.1. Hamiltoniano de amarre fuerte

Para construir el Hamiltoniano se toma en cuenta que la energía de acoplamiento entre cada átomo de carbono y sus primeros vecinos es  $t_0 = 2.8$  eV y la distancia entre cada átomo de carbono es  $a = 0.142$  nm. Considerando solo las interacciones a primeros vecinos el Hamiltoniano de amarre fuerte para electrones en una cinta de grafeno es el siguiente:

$$H = -t_0 \sum_{i,j} |i^A\rangle \langle j^B| + \text{H.c.} \quad (4.1)$$

$|i^{A/B}\rangle$  representa los orbitales  $p_z$  de las subredes A y B respectivamente en la posición  $r_i$ , la suma se hace para cada uno de los primeros vecinos de cada átomo de la red. Este Hamiltoniano permite obtener una descripción acertada de la estructura de bandas del grafeno así como de sus propiedades eléctricas.

### 4.1.1. Estructura electrónica de bandas del grafeno

La estructura de bandas se obtiene resolviendo la ecuación de Schrödinger, para resolver la ecuación de Schrödinger se hace el *ansatz*

$$|\psi\rangle = \sum_j e^{i\vec{k}\vec{R}_j} (a_1|\phi_j^A\rangle + a_2|\phi_j^B\rangle). \quad (4.2)$$

multiplicando a la izquierda por  $\langle\phi_m^{A/B}|$  se obtiene un sistema de ecuaciones para los coeficientes  $a_1$  y  $a_2$

$$\varepsilon(\vec{k}) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & h(\vec{k}) \\ h^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

donde,

$$h(\vec{k}) = -te^{3ik_x a} \left[ 1 + 2e^{-3ik_x a/2} \cos(\sqrt{3}k_y a/2) \right]. \quad (4.4)$$

para obtener las energías propias se resuelve la ecuación 4.3 bajo la condición que el determinante debe ser igual a cero, para las que se obtiene

$$\varepsilon(\vec{k}) = \pm t \left[ 3 + 4 \cos\left(\frac{3k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) + 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) \right]. \quad (4.5)$$

A partir de las cuales se obtiene la estructura de bandas de energía del grafeno, Figura 4.1. Los orbitales  $p_z$  forman dos bandas  $\pi$  una completamente ocupada y una completamente vacía, comúnmente llamadas bandas ocupada y vacía. La energía de Fermi de una cinta de grafeno está justo entre ambas bandas en  $\mu = 0$ , en este valor las bandas se intersecan en seis puntos que son los vértices la zona de Brillouin. Estos punto de intersección de las bandas se conocen como puntos de Dirac, la razón de su nombre se da en la siguiente sección. La zona de Brillouin es la celda unitaria que se construye en el espacio de frecuencias a partir de los vectores recíprocos que se obtienen a partir de los vectores base de la red de Bravais. De los seis puntos, dos son no equivalentes, ya que los otros puntos pueden ser transformados al añadir un vector recíproco de la red. Los dos puntos no equivalentes están representados por los vectores:

$$\mathbf{K}^- = \frac{2\pi}{3a} \left( 1, \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \quad \text{y} \quad \mathbf{K}^+ = \frac{2\pi}{3a} \left( 1, -\frac{1}{\sqrt{3}} \right). \quad (4.6)$$



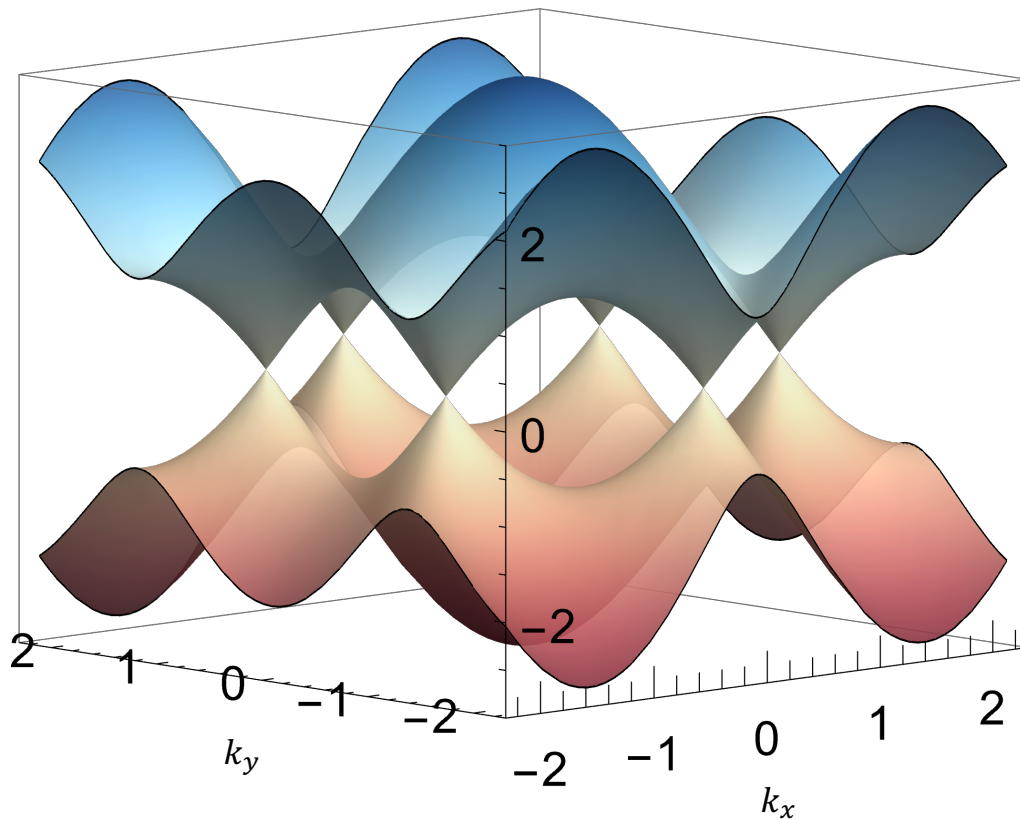


Figura 4.1: Estructura de bandas del grafeno. En  $\mu = 0$ , la energía de Fermi para grafeno prístino se gráfica un plano que interseca a las bandas de energía. En esta intersección las bandas muestran un valor mínimo en seis puntos diferentes llamados puntos de Dirac. Estos puntos son los vértices de una zona hexagonal llamada zona de Brillouin. Alrededor de los puntos de Dirac se observa que las bandas forman conos que implica que los electrones sigan una relación de dispersión lineal

Estos puntos son de fundamental importancia en este estudio ya que otorgan a los electrones en el sistema un nuevo grado de libertad. En la Figura 4.1 se puede ver que alrededor de estos puntos los electrones siguen una relación de dispersión lineal. Esto se puede comprobar haciendo un desarrollo de Taylor alrededor de  $\mathbf{K}^-$  y  $\mathbf{K}^+$ . Linealizando la función 4.3 se obtiene:

$$h(k) \approx -\hbar v_f (iq_x \pm q_y). \quad (4.7)$$

que al ser evaluada en  $\mathbf{K}^-$  y  $\mathbf{K}^+$  se obtienen los hamiltonianos

$$\mathbf{H}_{\mathbf{K}^-} = \hbar v_f \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y \\ q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{H}_{\mathbf{K}^+} = \hbar v_f \begin{pmatrix} 0 & q_x + iq_y \\ q_x - iq_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.8)$$

donde

$$v_f \equiv \frac{3at_0}{2\hbar} \approx 10^6 \text{ m/s}, \quad (4.9)$$

es la velocidad de Fermi y  $q$  es la cantidad de movimiento medida con respecto a los puntos de Dirac. Estos Hamiltonianos son tipo Dirac y describen el comportamiento de fermiones relativistas sin masa, por esta razón los puntos son llamados puntos de Dirac

El modelo presentado en el capítulo anterior representa la parte principal de este estudio. En esta sección se presenta una descripción semiclásica continua de las trayectorias de los electrones que complementan la parte anterior. Por un lado confirman los resultados que se obtienen con el modelo de amarre fuerte y además sirven para predecir resultados en sistemas mucho más grandes ya que el cálculo de las trayectorias requiere menos poder computacional. Se ha demostrado bajo las modificaciones consideradas en la ecuación 3.3, que el Hamiltoniano de amarre fuerte se puede aproximar por un Hamiltoniano continuo tipo Dirac que describe fermiones en un espacio curvo. Esta aproximación se hace en el límite de longitud de onda larga, es decir, a bajas energías, cuando la longitud de onda de los electrones es mayor que la distancia entre los átomos de carbono [29, 30, 48, 63].

$$H_D = iv_f \sigma^l (\partial_l - iK_l) \quad (5.1)$$

donde  $v_f$  es la velocidad de fermi y  $\sigma^l$  ( $l = 1, 2$ ) son las matrices de Pauli y  $K_l$  son vectores constantes que determinan la posición de los puntos de Dirac. Al someter a estrés la cinta de grafeno para ser deformada se debe tomar en cuenta esto en el Hamiltoniano de Dirac, de modo que

$$H_D = i\hbar v_f \sigma^l e_l^a(x) (\partial_a - i\mathbf{K}_a^\pm(x)), \quad (5.2)$$

debido a la deformación la posición de los valles  $\mathbf{K}^-$  y  $\mathbf{K}^+$  ahora depende de su posición en la cinta de grafeno y el término  $\mathbf{K}^\pm(x)$  se puede ver como un potencial vectorial.

$$\mathbf{K}^\pm(x) = \mathbf{K}^\pm \pm \frac{\beta}{2} (-2\varepsilon_{xy}(x), \varepsilon_{yy}(x) - \varepsilon_{xx}(x)). \quad (5.3)$$

Al calcular el rotacional de este potencial se obtiene la expresión

$$B^\pm(x) = \pm \frac{\beta}{2} (\partial_x \epsilon_{yy}(x) - \partial_x \epsilon_{xx}(x) + 2\partial_y \epsilon_{xy}(x)), \quad (5.4)$$

Un campo pseudo magnético perpendicular a la cinta de grafeno que a diferencia de un campo magnético real no modifica la simetría de inversión temporal. Actúa sobre los electrones con diferente signo, de acuerdo al estado de valle en el que están, denominado espín de valle [39, 44, 63]. Los diferentes patrones que se obtienen para las deformaciones empleadas se muestran en el capítulo 6. Para el caso en que las oscilaciones de la membrana sean mayores a las comparadas con la movilidad de los electrones y deba considerarse una membrana no estática. Al no ser estática la membrana, el potencial vectorial dependerá del tiempo  $\mathbf{K}^\pm(x, t)$ . Se puede calcular el negativo del gradiente del potencial  $\mathbf{K}^\pm(x, t)$  para obtener una expresión para el campo pseudo eléctrico. Dependiendo de su magnitud puede afectar en mayor o menor medida a los electrones. En el capítulo 9, sección 9.3 se muestra un estudio del efecto de un campo eléctrico constante aplicado en la dirección  $x$ , con el objetivo de ejemplificar el efecto del campo pseudo eléctrico sobre la densidad de corriente.

## 5.1. Líneas de corriente

A bajas energías y para deformaciones más grandes que la longitud de onda de los electrones la aproximación de la óptica geométrica puede ser aplicada al Hamiltoniano de Dirac. Se ha demostrado que el flujo de corriente de electrones en grafeno deformado puede ser predicho por trayectorias semi clásicas calculadas mediante la ecuación [63]

$$\frac{dv^i}{d\tau} = -\Gamma_{kl}^i v^k v^l + \sqrt{g} g^{ij} \epsilon_{jk} v^k B^\pm, \quad (5.5)$$

que describe fermiones relativistas sin masa que se mueven en un espacio curvo y sometidos a un campo pseudo-magnético  $B^\pm$ .  $v^i(\tau) = dx^i(\tau)/d\tau$  es la velocidad de las partículas. El primer término del lado derecho de la ecuación toma en cuenta la curvatura del sistema a través de los símbolos de Christoffel

$$\Gamma_{kl}^i = \frac{1}{2} g^{ij} (\partial_k g_{jl} + \partial_l g_{kj} - \partial_j g_{kl}). \quad (5.6)$$

El segundo término describe la fuerza electromagnética, donde  $g^{ij} = \delta_{ij} - 2\beta\varepsilon_{ij}(x)$  es la métrica efectiva y  $\varepsilon_{ij}$  es el símbolo de Levi-Civita en dos dimensiones. De la estructura de la ecuación 5.5 se puede determinar que las propiedades del dispositivo permanecen iguales si las dimensiones del nano resonador y el valor de la amplitud  $A_0$  de los modos de vibración se incrementan en un factor  $\alpha$ , lo que permitiría mantener el mismo valor para el estrés en el sistema. Debido a que los valores de la amplitud no pueden aumentarse libremente por las limitaciones experimentales, lo anterior es equivalente a aumentar el tamaño del sistema y mantener el valor de la amplitud, reduciendo el estrés en el sistema y por tanto la intensidad del campo pseudo magnético, esto se compensa disminuyendo la energía de los electrones por un factor  $\alpha^2$ . Esto se muestra en la figura 5.1.

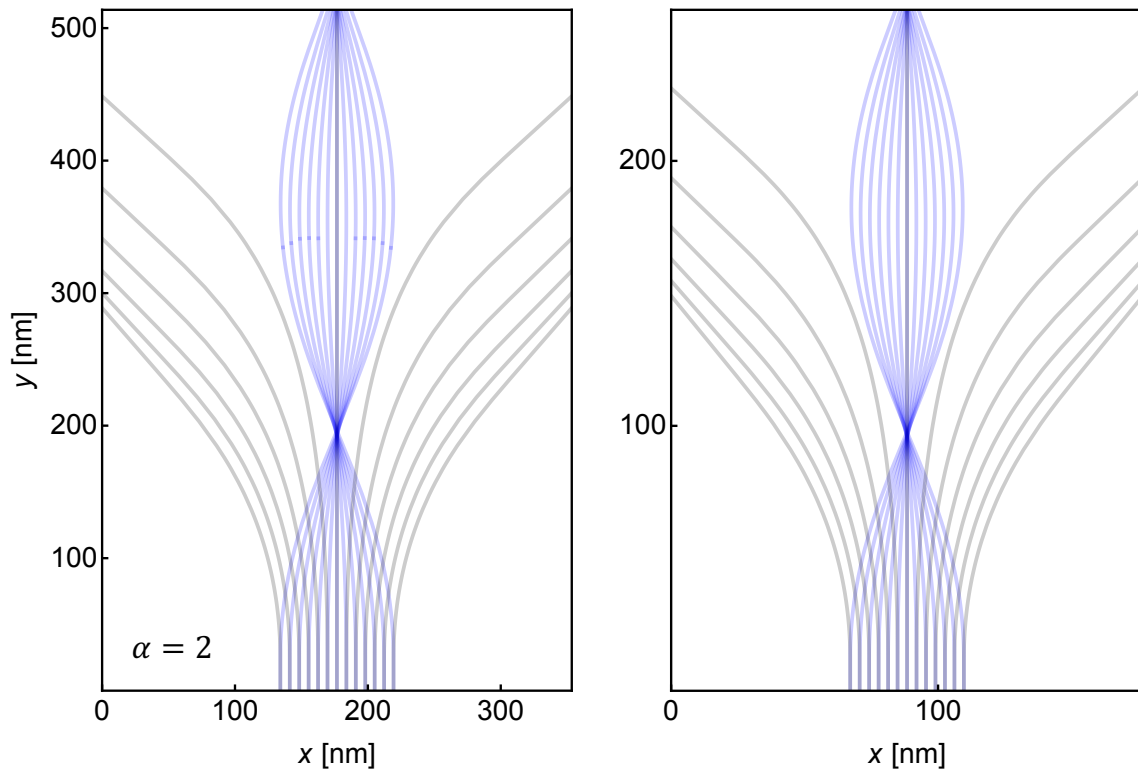


Figura 5.1: Trayectorias semiclásicas calculadas para dos sistemas. Para el sistema del lado izquierdo  $\alpha = 2$  es decir, el sistema es dos veces mas grande. La energía del lado izquierdo es de 200meV y del lado derecho 800meV, aumenta un factor  $\alpha^2$

## 5.2. Estrés máximo

En la ecuación 5.2, los vectores  $e_l(x)$  describen la curvatura de la membrana localmente y se determinan a partir del tensor de estrés.

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \partial_i h(x) \partial_j h(x) \quad (5.7)$$

Esta cantidad se calculó para los dos tipos de membranas a lo largo de toda la cinta y para cada nodo. Para caracterizar la deformación en cada caso se calculó la norma del tensor de estrés y se busca el valor máximo aplicado sobre la membrana. Los valores máximos de estrés para cada caso son presentados en las siguientes secciones. Con el objetivo de brindar resultados que pudieran ser reproducibles experimentalmente con mayor facilidad los porcentajes del estrés aplicado para generar las deformaciones se mantuvieron entre el 0.1 % y 1 %.

## Modelos para nano dispositivos

El dispositivo estudiado en este trabajo es un sistema que está fuera del equilibrio al estar conectado a dos contactos, para el estudio de este dispositivo se requiere de un formalismo que permita describir sistemas bajo estas condiciones. Comúnmente para sistemas en la nanoescala que están en equilibrio se suelen utilizar las ecuaciones de Schrodinger y Poisson para describir sistemas en equilibrio. Para esto se debe hallar el Hamiltoniano  $H$  que describe al sistema aislado, cuando el dispositivo es conectado a un contacto surge un potencial  $U(r)$  que se calcula de forma autoconsistente. Se itera entre la ecuación de Poisson que nos da el potencial  $U(r)$  para una densidad de electrones dada [19].

$$\nabla \cdot (\epsilon \nabla U) = q^2 [N_D - n] \quad (6.1)$$

y la ecuación de la mecánica estadística que nos da la densidad de electrones para un sistema en equilibrio dado un potencial  $U(r)$

$$n(r) = \sum_{\alpha} |\psi_{\alpha}(r)|^2 f_0(\epsilon_{\alpha} - \mu) \quad (6.2)$$

Los eigenestados  $\psi_{\alpha}(r)$  de la ecuación

$$[H + U]\psi_{\alpha}(r) = \epsilon \psi_{\alpha}(r) \quad (6.3)$$

son llenados de acuerdo con la función de Fermi:

$$f_0(E - \mu) \equiv [1 + \exp(E - \mu)/k_b T]^{-1} \quad (6.4)$$

Para el problema que estudiamos en esta tesis es necesario un enfoque diferente ya que el sistema estudiado está conectado a contactos con diferentes niveles de energía llevando al sistema fuera del equilibrio.

## 6.1. Matriz de densidad y función espectral

En mecánica estadística fuera del equilibrio se requiere determinar la matriz de densidad  $\rho_{\alpha\beta}$  que permite describir estados que pueden ser ocupados de forma correlacionada, la densidad de electrones se determina a partir de la ecuación:

$$n(r) = \sum_{\alpha\beta} \psi_{\alpha}(r) \psi_{\beta}(r) \rho_{\alpha\beta} \quad (6.5)$$

El objetivo principal es obtener la matriz de densidad en una representación en la que esta sea diagonal. La matriz de densidad nos da la densidad de electrones y permite calcular otras propiedades de interés. En general para obtener  $[\rho]$  en el espacio real, donde es diagonal, se debe realizar la siguiente transformación unitaria:

$$[\rho]_{er} = [V][\rho][V]^{\dagger}, \quad (6.6)$$

donde  $[V]$  es una matriz cuyas columnas son los eigenvectores del Hamiltoniano del sistema y donde la matriz de densidad es:

$$[\rho] = f_0([H - \mu I]), \quad (6.7)$$

Esta ecuación nos dice que la matriz de densidad en equilibrio es la función de Fermi de la matriz Hamiltoniana en cualquier representación. Dentro del formalismo de funciones de Green fuera del equilibrio, empezamos reescribiendo la ecuación 6.7 de la siguiente forma:

$$[\rho] = \int_{+\infty}^{-\infty} f_0(E - \mu) \delta([EI - H]) \quad (6.8)$$

usando la siguiente definición de la función delta:

$$2\pi\delta(x) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \left[ \frac{i}{x + i\eta} - \frac{i}{x - i\eta} \right] \quad (6.9)$$



se tiene que:

$$\delta([EI - H]) = \frac{i}{2\pi}([(E + i\eta)I - H]^{-1} - [(E - i\eta)I - H]^{-1}) \quad (6.10)$$

Definiendo la función  $[A(E)]$  de la siguiente forma:

$$[A(E)] = 2\pi\delta([EI - H]) = i([G(E)] - [G(E)]^\dagger) \quad (6.11)$$

donde  $[G(E)]$  y  $[G(E)]^\dagger$  son las funciones de Green atrasada y avanzada. Se puede reescribir la matriz de densidad como:

$$[\rho] = \int_{+\infty}^{-\infty} f_0(E - \mu)[A(E)] \quad (6.12)$$

La función espectral se puede interpretar como la densidad de estados disponibles que al ser llenados siguiendo la función de Fermi dan la densidad de electrones[18, 19].

## 6.2. Formalismo de funciones de Green

Se presenta a continuación una introducción al formalismo de funciones de Green. Es un enfoque que permite describir sistemas fuera del equilibrio. Este método permite tomar en cuenta cualquier contacto o interacción externa. La función de Green es una generalización de la matriz de dispersión. Permite describir la respuesta en cualquier punto  $\mathbf{r}$  debida a una excitación en el punto  $\mathbf{r}'$ . Se usa cuando esta respuesta se relaciona con la excitación a través de un operador diferencial. Para introducir las ecuaciones utilizadas en este formalismo se presenta una breve introducción a la descripción matemática del sistema formado por un dispositivo conectado a un contacto. En este caso el sistema se encuentra en equilibrio y no hay flujo de corriente. La ecuación de Schrödinger que describe un dispositivo conectado a un contacto es la siguiente:

$$\begin{pmatrix} EI_R - H_R - i\eta & -\tau \\ -\tau^\dagger & EI - H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_R + \chi \\ \psi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_R \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (6.13)$$

En esta ecuación la energía  $E$  ya no es una autoenergía del dispositivo, es una variable que representa las excitaciones que provienen de fuentes externas. Las funciones  $\Phi_R$  pertenecen al contacto antes de acoplar el dispositivo. Cuando se conecta el dispositivo al contacto la función de onda del contacto se "derrama" dando lugar a las funciones  $\psi$  dentro del dispositivo que generan las ondas dispersadas  $\chi$ . En un problema discreto la ecuación 6.13 es una ecuación matricial que se puede partir en submatrices. El término  $S_R$  representa la reinyección de electrones por una fuente externa, si se asume que permanece constante, este término puede removerse y se obtienen las ecuaciones:

$$[EI_R - H_R]\chi - [\tau^\dagger]\psi = 0 \quad (6.14)$$

y

$$[EI - H]\psi - [\tau]\chi = [\tau]\Phi_R \quad (6.15)$$

manejando estas ecuaciones con álgebra matricial se obtiene que las ondas dispersadas están descritas por:

$$\chi = G_R \tau^\dagger \psi \quad (6.16)$$

donde:

$$G_R \equiv [EI_R - H_R + iV]^{-1} \quad (6.17)$$

Se obtiene también la ecuación para determinar las funciones de onda del dispositivo

$$[EI - H - \Sigma]\psi = S \quad (6.18)$$

En general las soluciones para esta ecuación se pueden escribir de la siguiente forma:

$$\psi = GS, \quad (6.19)$$

donde:

$$G \equiv [EI - H - \Sigma]^{-1} \quad \text{y} \quad S \equiv \tau\Phi_R, \quad (6.20)$$

y se ha definido:

$$\Sigma \equiv \tau G \tau^\dagger \quad (6.21)$$

el término  $\Sigma$  describe la interacción del contacto con el dispositivo y se puede ver como una modificación dependiente de la energía que se hace al hamiltoniano para tomar en cuenta condiciones de frontera. Las dimensiones de las matrices en la ecuación corresponden con el número de puntos del sistema. La matriz de acoplamiento  $\tau_p$  es cero para todos los puntos del contacto excepto para los puntos contiguos al sistema. La matriz de densidad se obtiene al llenar la función espectral mediante la siguiente definición:

$$A(E) = i[G - G^\dagger] \quad (6.22)$$

### 6.2.1. Matriz de ensanchamiento

Una cantidad importante que se puede definir para un sistema compuesto por un dispositivo conectado a un contacto es el ensanchamiento de los niveles de energía  $\Gamma$ , que es la parte imaginaria de la auto energía  $\Sigma$ . Esta cantidad también se relaciona con el inverso del tiempo de vida de un nivel de energía. En este caso ya la auto energía es una matriz, se define la matriz de ensanchamiento  $\Gamma(E)$  como su parte antihermitiana:

$$\Gamma(E) = i[\Gamma(E) - \Gamma(E)^\dagger] \quad (6.23)$$

## 6.3. Sistema fuera del equilibrio

El sistema estudiado en este trabajo es un dispositivo conectado a dos contactos. En este caso el sistema se encuentra fuera del equilibrio. El sistema es conectado a dos contactos denominados fuente y drenaje. Las funciones de onda de estos contactos antes de conectar el dispositivo son  $\Phi_1$  y  $\Phi_2$  y satisfacen por separado las ecuación de schrodinger:

$$[EI - H_1 + i\eta]\Phi_1 = S_1 \quad (6.24)$$

y

$$[EI - H_2 + i\eta]\Phi_2 = S_2 \quad (6.25)$$

perteneciente a cada contacto. En estas ecuaciones  $H_1$  y  $H_2$  son los Hamiltonianos de los contactos. Al acoplar los contactos al dispositivo los estados en los contactos se "desparra-

man" dando lugar a las funciones de onda  $\psi$  en el dispositivo, que a su vez excitan ondas dispersas  $\chi_1$  y  $\chi_2$  en la fuente y el drenaje. La ecuación que describe el sistema completo es entonces la siguiente:

$$\begin{pmatrix} EI - H_1 - i\eta & -\tau_1^\dagger & 0 \\ -\tau_1 & EI - H & -\tau_2 \\ 0 & -\tau_2^\dagger & EI - H_2 + i\eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_1 + \chi_1 \\ \psi \\ \Phi_2 + \chi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_1 \\ 0 \\ S_2 \end{pmatrix}, \quad (6.26)$$

donde  $H$  es el hamiltoniano del dispositivo, de aqui se obtiene que:

$$\chi_1 = G_1 \tau_1^\dagger \psi \quad y \quad \chi_2 = G_2 \tau_2^\dagger \psi \quad (6.27)$$

donde:

$$G_1 = [EI - H_1 - i\eta]^{-1} \quad y \quad G_2 = [EI - H_2 - i\eta]^{-1} \quad (6.28)$$

Utilizando estas definiciones en la ecuación de en medio en 6.26, se obtiene:

$$[EI - H - \Sigma_1 - \Sigma_2] \psi = S \quad (6.29)$$

se han definido las funciones de autoenergía  $\Sigma_1$  y  $\Sigma_2$  como:

$$\Sigma_1 = \tau_1 G \tau_1^\dagger \quad y \quad \Sigma_2 = \tau_2 G \tau_2^\dagger \quad (6.30)$$

y el término  $S = \tau_1 \Phi_1 + \tau_2 \Phi_2$ , las matrices de ensanchamiento correspondientes son:

$$\Gamma_1 = \tau_1 A_1 \tau_1 \quad y \quad \Gamma_2 = \tau_2 A_2 \tau_2 \quad (6.31)$$

Las funciones espectrales correspondientes a cada contacto son:

$$A_1 = i[G_1 - G_1^\dagger] \quad y \quad A_2 = i[G_2 - G_2^\dagger] \quad (6.32)$$

Para poder evaluar la matriz de densidad del dispositivo se define su función de Green de la siguiente manera:

$$G \equiv [EI - H - \Sigma_1 - \Sigma_2]^{-1} \quad (6.33)$$

que se emplea para expresar la función de onda del dispositivo en términos de las funciones de onda de la fuente

$$\psi = GS \quad (6.34)$$

por tanto:

$$\rho = \int \frac{dE}{2\pi} G \Sigma_{\text{in}} G^\dagger \quad (6.35)$$

donde:

$$\Sigma_{\text{in}} = \Gamma_1 f_1 + \Gamma_2 f_2 \quad (6.36)$$

### 6.3.1. Flujo de corriente

Una vez que se ha calculado la matriz de densidad para un sistema fuera del equilibrio se puede estudiar la ecuación de schrodinger dependiente del tiempo:

$$I \equiv \frac{d}{dt} (\psi^\dagger \psi) \quad (6.37)$$

para un sistema conectado a dos contactos, uno donde se inyecta corriente (fuente) y uno donde se colecta la corriente (drenaje), se determina que el flujo de corriente entrante es:

$$I_{\text{f}} = \frac{1}{h} \int dE f_{\text{f}}(E) \text{Tr}[\Gamma_{\text{f}} A] \quad (6.38)$$

y de una forma similar se determina que el flujo de salida está dado por:

$$I_{\text{d}} = \frac{1}{h} \int dE \text{Tr}[\Gamma_{\text{d}} G^n] \quad (6.39)$$

donde  $G^n = G \Sigma_{\text{in}} G^\dagger$  y  $\Sigma_{\text{in}}$  está dada por la ecuación 6.36. La corriente neta calculada para un contacto  $i$  está dada por la diferencia entre el flujo de entrada y el flujo de salida, multiplicado por la carga, de modo que:

$$I_i = -\frac{q}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left( \text{Tr}[\Gamma_i A] f_i - \text{Tr}[\Gamma_i G^n] \right) \quad (6.40)$$

Dada la naturaleza discreta del problema estudiado es útil determinar una expresión para el flujo de corriente entre los átomos de carbono en las posiciones  $r_i$  y  $r_j$ .

$$I_{ij} = \frac{iq}{2\pi} \left( t_{ij} G_{ji}^n - t_{ji} G_{ij}^n \right) = \text{Im} \left( t_{ij} (G \Sigma_{\text{in}} G^\dagger)_{ij} \right). \quad (6.41)$$

Esta cantidad es calculada para cada par de átomos de carbono del dispositivo. En la figura 6.1 se muestra un anillo de grafeno y se grafica la corriente local de un átomo de carbono a otro para todos los átomos del anillo. En el medio se muestra la corriente promedio para todo el anillo.

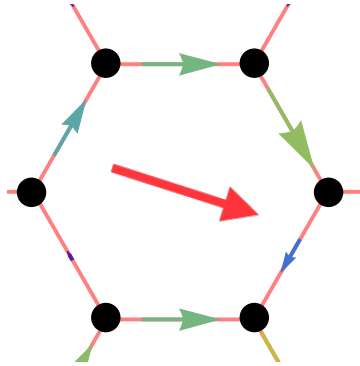


Figura 6.1: Flujo de corriente local entre los átomos de carbono representada para un anillo de grafeno en el centro se muestra con una flecha roja la corriente promedio, este promedio se hace para todos los anillos de grafeno de la red para obtener la densidad de corriente

### 6.3.2. Función de Green para el nano resonador

Para estudiar el flujo de corriente en el dispositivo propuesto se utilizó el formalismo de funciones de Green descrito en la sección anterior. La función de green del dispositivo propuesto es:

$$G(E) = (E - H - \Sigma)^{-1}, \quad (6.42)$$

$E$  es la energía con la que los electrones son inyectados en el sistema y  $H$  es el Hamiltoniano de amarre fuerte. La auto energía  $\Sigma = -i \sum_{i \in \text{borde}} |i\rangle \langle i|$  es un potencial complejo en el borde del sistema que absorbe electrones y suprime efectos de tamaño finito. Se puede pensar como un Hamiltoniano efectivo que describe la interacción del dispositivo con los contactos. Un sistema abierto tiene un espectro de energía continuo. El método de autoenergía trata las condiciones de frontera de forma exacta lo que permite calcular la función espectral exacta de un sistema

abierto. Para sistemas simples como sistemas  $1D$  o el sistema que se estudia en esta tesis las matrices de autoenergía se pueden obtener a partir de argumentos simples. En este trabajo para construir la matriz que describe la interacción del sistema con los contactos se utilizaron dos modelos de contacto diferentes. Cada uno describe una forma de interacción diferente. Ambos modelos descritos nos permiten representar situaciones opuestas que podrían darse experimentalmente. En el modelo de onda plana, los electrones se propagan en una dirección preferente esto produce un haz de electrones colineal. El modelo de banda ancha describe un haz de electrones que al ser inyectado es fuertemente dispersado.

### 6.3.3. Contactos de onda plana

En el modelo de contactos de onda, el contacto donde son inyectados los electrones es modelado por la función de dispersión 6.43, los electrones se inyectan como ondas planas.

$$\Sigma_{\text{in}}^{\text{PW}} = \sum_{i,j \in \text{contact}} A(r_i)A(r_j) \psi_j^*(k) \psi_i(k) |i\rangle \langle j|, \quad (6.43)$$

En la ecuación 6.43, la suma se realiza sobre los átomos de carbono del contacto.  $\psi_i(k)$  son ondas planas eigenestados del Hamiltoniano de Dirac del grafeno

$$\psi_i(k) = \begin{cases} c^- e^{(k+K^-)r_i} + c^+ e^{(k+K^+)r_i} & i \in A, \\ \sigma c^- e^{(k+K^-)r_i + \phi} - \sigma c^+ e^{(k+K^+)r_i - i\phi} & i \in B, \end{cases} \quad (6.44)$$

$\phi = \arg(ik_x + k_y)$ . Los parámetros  $c^\pm$  permiten determinar el porcentaje de electrones que ocupan estados en ambos valles. En todos los casos estudiados se consideraron haces de electrones igualmente mezclados, esto es  $c^\pm = \pm 0.5$ . La función  $A(r)$  determina el perfil del haz de electrones inyectado, para la que se eligió un perfil Gaussiano

$$A(r) = e^{-((r-r_0)/w_0)^2} \quad (6.45)$$

donde  $r_0$  y  $w_0$  controlan la posición y el ancho del haz de electrones inyectado. El ancho del haz puede influir en los resultados debido a la interacción con los bordes, se determinó que se obtenían mejores resultados para la densidad de corriente al utilizar haces con un ancho equivalente al 30% del ancho del sistema.

### 6.3.4. Contactos de banda ancha

En este modelo en el contacto de inyección, los electrones tienen una densidad de estados constante 6.46 y que no depende de la energía. Se fija un valor  $\eta = t_0$ .

$$\Sigma_{\text{in}}^{\text{WB}} = -\eta|i\rangle\langle j|, \quad (6.46)$$

En este estudio los resultados no dependen de este valor. A través de este contacto, los electrones no polarizados son inyectados con energía  $E$  y son dispersados a lo largo del sistema.

## 6.4. Polarización de valle

El objetivo principal del estudio es determinar la funcionalidad del dispositivo propuesto para polarizar un haz de electrones, para esto es importante determinar una forma de saber si un haz está polarizado en el valle  $\mathbf{K}^+$  o  $\mathbf{K}^-$  y en qué porcentaje. Los electrones en grafeno pueden estar en uno de los dos estados mencionados, dependiendo en qué punto se encuentren en la zona de Brillouin, a esto se le conoce como polarización de valle. La polarización de valle de un estado  $|\phi\rangle$  precisa en qué proporción este estado ocupa los valles  $\mathbf{K}^\pm$  para un átomo en la cinta de grafeno. El cálculo se realiza haciendo la proyección  $P(k) = \langle \psi(k) | \phi \rangle^2$  sobre las eigenfunciones del grafeno 4.5. Esta cantidad se calcula para todos los átomos dentro de un área finita  $A_i$  del sistema. En este trabajo dichas áreas son representadas por rectángulos sombreados grises.

$$P_i(k) = \langle \psi(k) | G \Sigma_{\text{in}} G^\dagger | \psi(k) \rangle_{A_i}. \quad (6.47)$$

Para obtener un valor de la polarización la densidad espectral  $P_i(k)$  se integra alrededor de los valles

$$P_i^\pm = \int_{k \in K^\pm} d^2k P_i(k) \quad (6.48)$$

con el objetivo de tener una mayor comprensión de los valores de la polarización para los diferentes casos estudiados se calcula:

$$P_i = \frac{P_i^+ - P_i^-}{P_i^+ + P_i^-}. \quad (6.49)$$



Si  $P_i = \pm 1$  los electrones están localizados en los valles  $\mathbf{K}^\pm$  perfectamente polarizados mientras que si  $P_i = 0$  están completamente no polarizados. Estos datos se presentan en porcentajes en los resultados. Los porcentajes positivos corresponden a polarizaciones en el valle  $\mathbf{K}^+$  y porcentajes negativos al valle  $\mathbf{K}^-$ . Otra forma de entender la polarización es graficando la

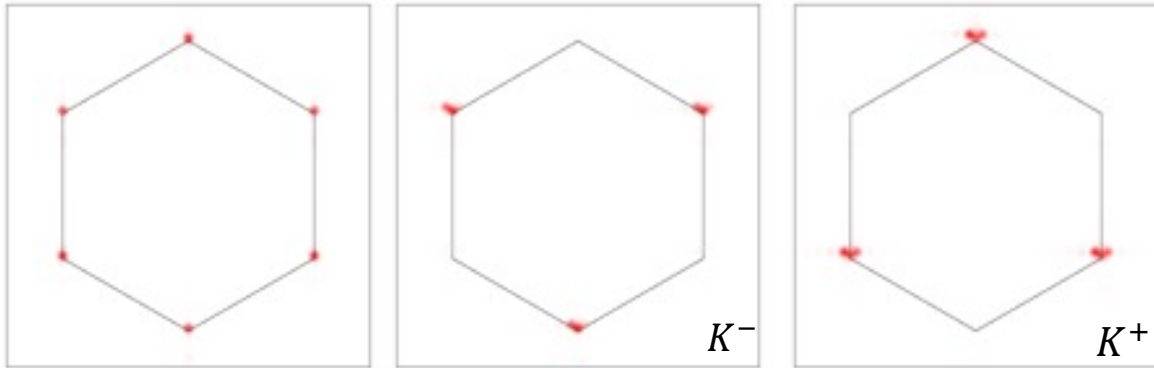


Figura 6.2: Densidades de estados en el espacio recíproco dentro de la zona de Brillouin para una haz no polarizado, un haz polarizado en el valle  $\mathbf{K}^+$  y en el valle  $\mathbf{K}^-$ .

densidad espectral  $P_i(k)$  en el espacio recíproco alrededor de los puntos  $\mathbf{K}^-$  y  $\mathbf{K}^+$ . En la figura 6.2 se muestran los tres resultados posibles, en rojo sombreado se grafica la densidad espectral  $P_i(k)$ . A la izquierda se muestra el caso en el que se tiene la misma cantidad de electrones tanto en el valle  $\mathbf{K}^-$  como en el valle  $\mathbf{K}^+$ , se observa que alrededor de los seis puntos de Dirac hay densidad de estados. El segundo solo se observa densidad de estados en los puntos  $\mathbf{K}^-$  esto muestra que los electrones están polarizados en este valle. A la derecha solo se observa densidad de estados en el valle  $\mathbf{K}^+$  esto indica que los electrones están polarizados en este valle.

## CAPÍTULO

# 7

## Nano resonadores con inyeccion en borde armchair

Se presenta primero el flujo de corriente en una cinta de grafeno sin ningún tipo de deformación. La corriente puede ser inyectada en el sistema principalmente por dos tipos de bordes, conocidos como armchair y zigzag mostrados en la figura 3.1, aunque hay otras formas de inyectar la corriente estas dos son las más comúnmente utilizadas. En esta tesis se eligió estudiar principalmente la inyección por el borde armchair. En la figura 7.1 se muestra la densidad de corriente en rojo sombreado para dos modelos de inyección. Se indica con flechas amarillas el campo vectorial de la corriente. Del lado izquierdo el modelo de onda plana los electrones tienen una energía de 200meV, se observa un comportamiento balístico. Los electrones atraviesan el sistema formando un haz bien definido. La densidad de corriente obtenida con el modelo de inyección de banda ancha se muestra del lado derecho, el flujo de corriente obtenido es muy disperso y se observa un patrón ondulado consecuencia de la interferencia del haz con electrones parcialmente reflejados en los bordes. Cualquiera de los dos modelos puede ser utilizado para inyectar electrones. El flujo de corriente obtenido en la práctica depende de cuales sean las condiciones experimentales de los contactos.

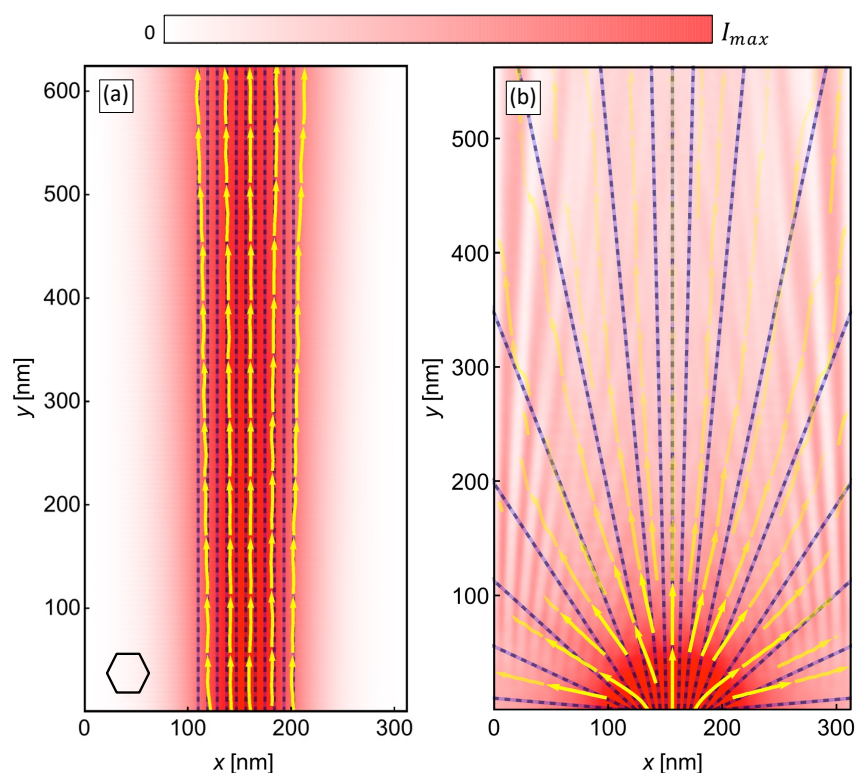


Figura 7.1: Flujo de corriente en grafeno prístino. Los electrones son inyectados en la parte inferior y colectados en la parte superior, ambos bordes tipo armchair. Se muestra el campo vectorial de corriente en amarillo, que ayuda a visualizar la dirección de la corriente y la densidad de corriente en rojo sombreado, ambos se promedian sobre cada anillo de la red. Las líneas sólidas azules y las líneas punteadas negras son trayectorias semi clásicas para los electrones en los valles  $\mathbf{K}^+$  y  $\mathbf{K}^-$ , respectivamente. (a) Electrones inyectados con el modelo de onda plana con  $E = 200\text{meV}$  forman un haz balístico. (b) Para el modelo de banda ancha los electrones son inyectados con  $E = 170\text{meV}$ , para el que se presenta una fuerte dispersión.

Para el estudio del sistema con deformaciones se ha supuesto que estas son estáticas debido a que sistemas de aproximadamente  $1\mu\text{m}$  [16, 59] oscilan entre 10 y 100MHz, valores de frecuencias más bajos que los valores relacionados con la movilidad de los electrones en el sistema ( aprox. 1THz), por lo que cambios en el sistema pueden considerarse adiabáticos.

## 7.1. Nano resonadores de grafeno circulares

En el estudio de nano resonadores de grafeno con membranas circulares se emplearon los modos de vibración de un tambor circular. Se presenta el estudio de cuatro modos de vibración (n,m) de una membrana circular de 280nm de diámetro, mostrados en la figura 7.2. Estos son cuatro de los principales modos de vibración de una membrana circular. Los patrones

de deformación obtenidos son relativamente simples y generan un estrés pequeño sobre la membrana. A medida que los valores de  $n$  y  $m$  aumentan el estrés también puede aumentar. La figura 7.3 muestra el mapa de la norma del tensor de estrés ejercido sobre la membrana

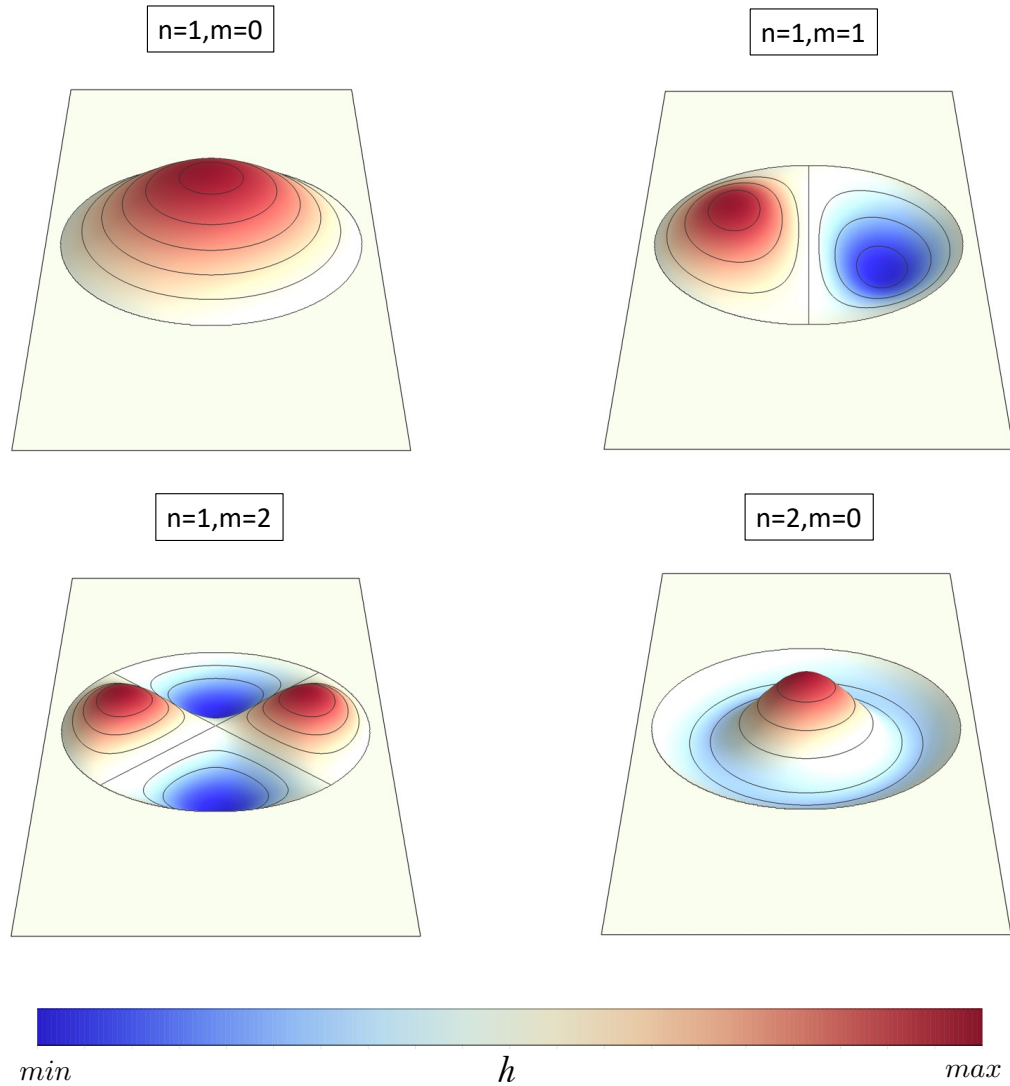


Figura 7.2: Perfiles de deformación de los cuatro nodos  $(n, m)$  de membrana circular usados en el estudio.

para los cuatro modos utilizados. El porcentaje máximo de estrés es diferente para los dos modelos de inyección de electrones. La figura 7.3 muestra los resultados para el modelo de onda plana. El sombreado rojo oscuro corresponde al valor máximo del estrés que es del 0.2%. La figura 7.4 muestra los campos pseudo magnéticos asociados a cada modo de vibración de la membrana circular. Se puede observar que los campos pseudo magnéticos son muy diferentes para cada modo. Las zonas de color rojo y azul pertenecen a signos opuestos del campo pseudo

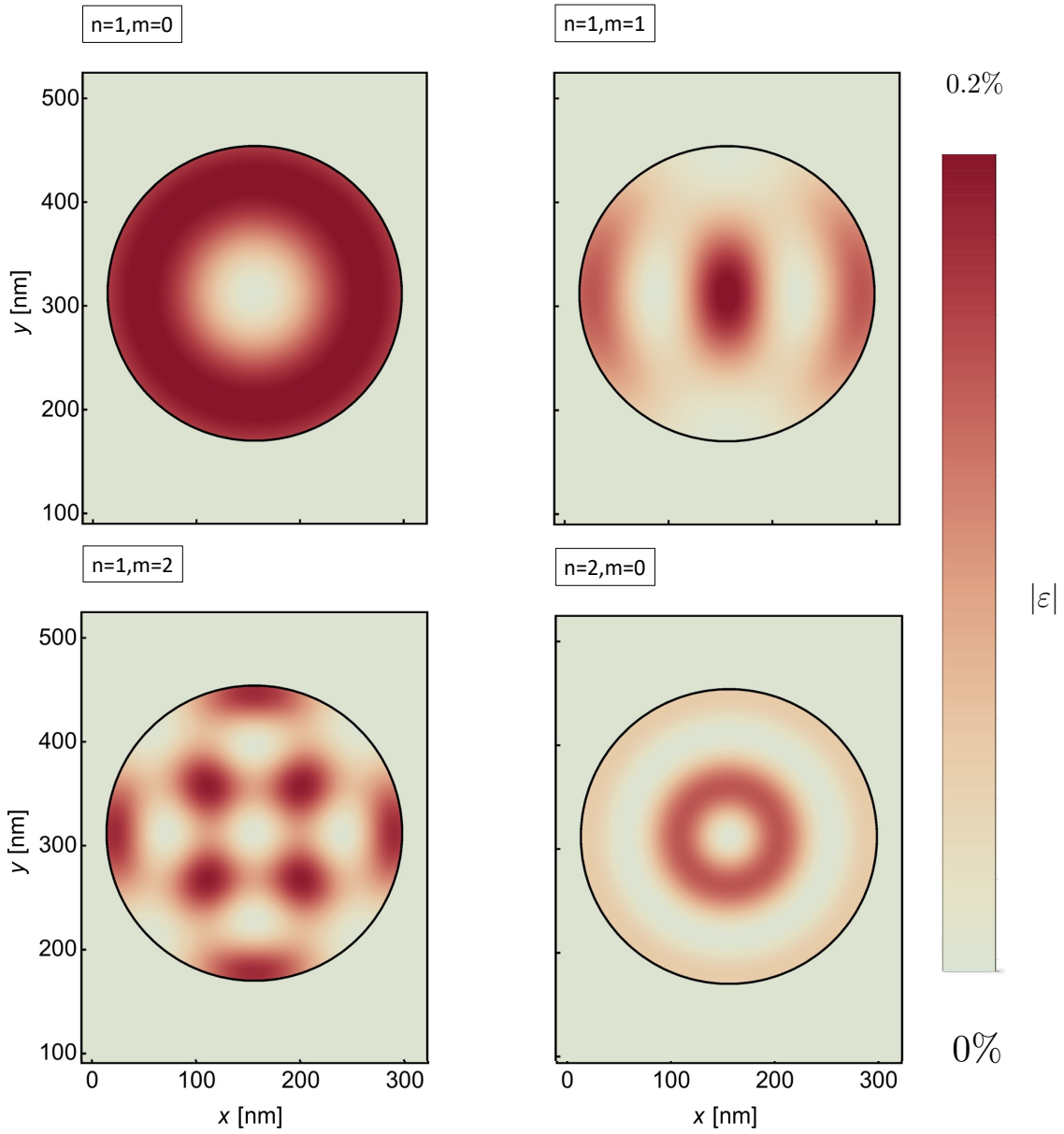


Figura 7.3: Densidad del estrés ejercido sobre la membrana para cada modo  $(n,m)$ , para el modelo de onda plana. El color rojo oscuro pertenece al valor máximo de la norma del tensor de estrés que es 0.2%.

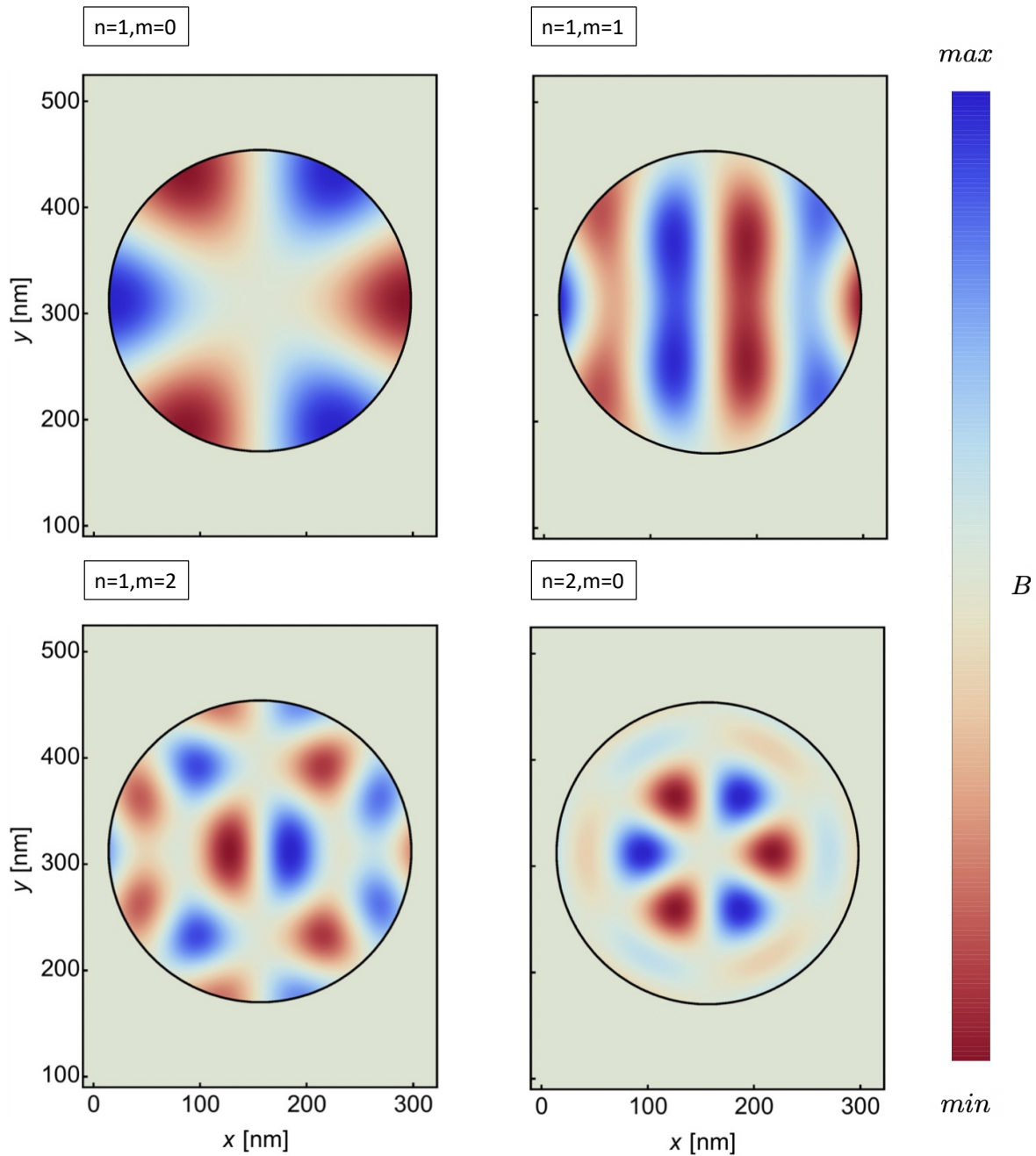


Figura 7.4: Campo pseudo magnético asociado a cada modo utilizado en el estudio de una membrana circular. Los diferentes modos dan como resultado diferentes patrones del campo. Los valores máximos del campo pseudo magnético están alrededor de  $B_{\max}^{\pm} \sim 1\mu\text{T}$ .

magnético, estos campos modifican las trayectorias de los electrones de acuerdo con su espín de valle y siguiendo la ley de Lorenz.

### 7.1.1. Inyección en onda plana

En nano resonadores con deformación circulares empleando el modelo de onda plana se fijó la energía de los electrones en  $E = 200\text{meV}$ , las densidades de corriente obtenidas se muestran en las figuras 7.5 para los modos  $(1,0)$  y  $(1,1)$  y en la figura 7.6 para los modos  $(1,2)$  y  $(2,0)$ , donde se comparan con las trayectorias semi clásicas correspondientes a cada caso. Se aprecia que las densidades de corriente son separadas en tres haces de electrones, dos que son desviados a los costados y uno que es enfocado por el centro del sistema. La densidad espectral  $P_i(k)$  se calculó en los rectángulos gris sombreados para determinar la polarización de los haces divididos. En el recuadro gris cerca a los puntos de inyección de la corriente los electrones ocupan ambos valles en la zona de Brillouin. Lo anterior indica que ahí la corriente no está polarizada. El porcentaje de la polarización es diferente de cero debido a reflexiones en los bordes del sistema que no son suprimidas. En los rectángulos de la parte superior hay estados polarizados solo en tres puntos de Dirac que son equivalentes. Para el haz central la corriente está polarizada en el valle opuesto al de las zonas laterales. La densidad espectral integrada alrededor de los diferentes valles da como resultado un valor de la polarización en una región. Este valor se ha indicado dentro de los rectángulos en cada figura en porcentajes. Los valores obtenidos muestran que una corriente que inicialmente estaba no polarizada se convierte en un haz con una muy buena polarización con valores  $P_i > 85\%$ . Esto demuestra que el dispositivo propuesto puede ser utilizado como un polarizador de valle. Es importante señalar que los valores del estrés máximo en la membrana circular obtenidos para los diferentes modos están entre  $0.13\%$  y  $0.2\%$ . Es fundamental obtener buena polarización manteniendo el estrés en porcentajes bajos ya que experimentalmente los valores que se pueden obtener son incluso menores que los que utilizamos aquí aunque estos valores siguen siendo razonables. Las energías utilizadas para los electrones son  $200\text{meV}$  en el modelo de onda plana y  $170\text{meV}$  en el modelo de banda ancha que dan una longitud de onda de Fermi entre  $\lambda_F = 3\pi_0 d_0 / E = 19\text{nm}$  y  $22\text{nm}$  valores mayores a la distancia interatómica pero menor que las longitudes de los modos de resonancia. Esto permite comparar el flujo de corriente con las trayectorias semiclásicas calculadas con 5.5. Esta comparación se muestra en las figuras

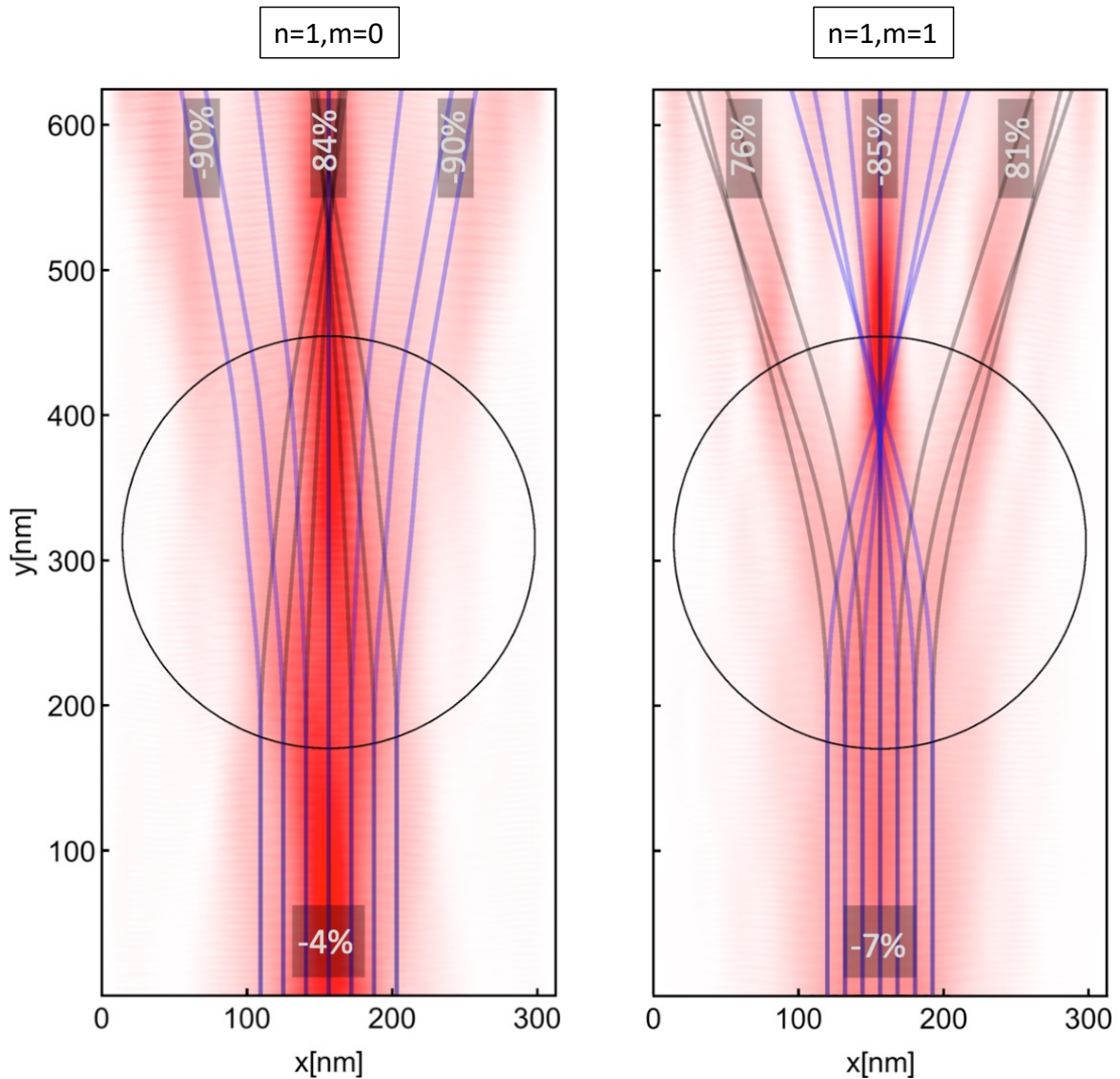


Figura 7.5: Flujo de corriente para los modos  $(1,0)$  y  $(1,1)$  de una membrana circular. El estrés máximo aplicado es  $0.17$  y  $0.18\%$  respectivamente. Los electrones son inyectados a  $E = 200\text{meV}$  en el modelo de onda plana. El radio de la deformación es  $r = 280\text{nm}$ . Un haz de electrones es dividido en tres haces más estrechos. Las líneas sólidas negras y azules son trayectorias semi clásicas para los electrones en los valles  $\mathbf{K}^+$  y  $\mathbf{K}^-$ , respectivamente. Las trayectorias acuerdan bien con el flujo de corriente, lo que permite estimar el flujo de corriente en sistemas más grandes. Las densidades espectrales  $P_i$  son calculadas en los rectángulos grises, los valores se muestran dentro de cada rectángulo en porcentajes.



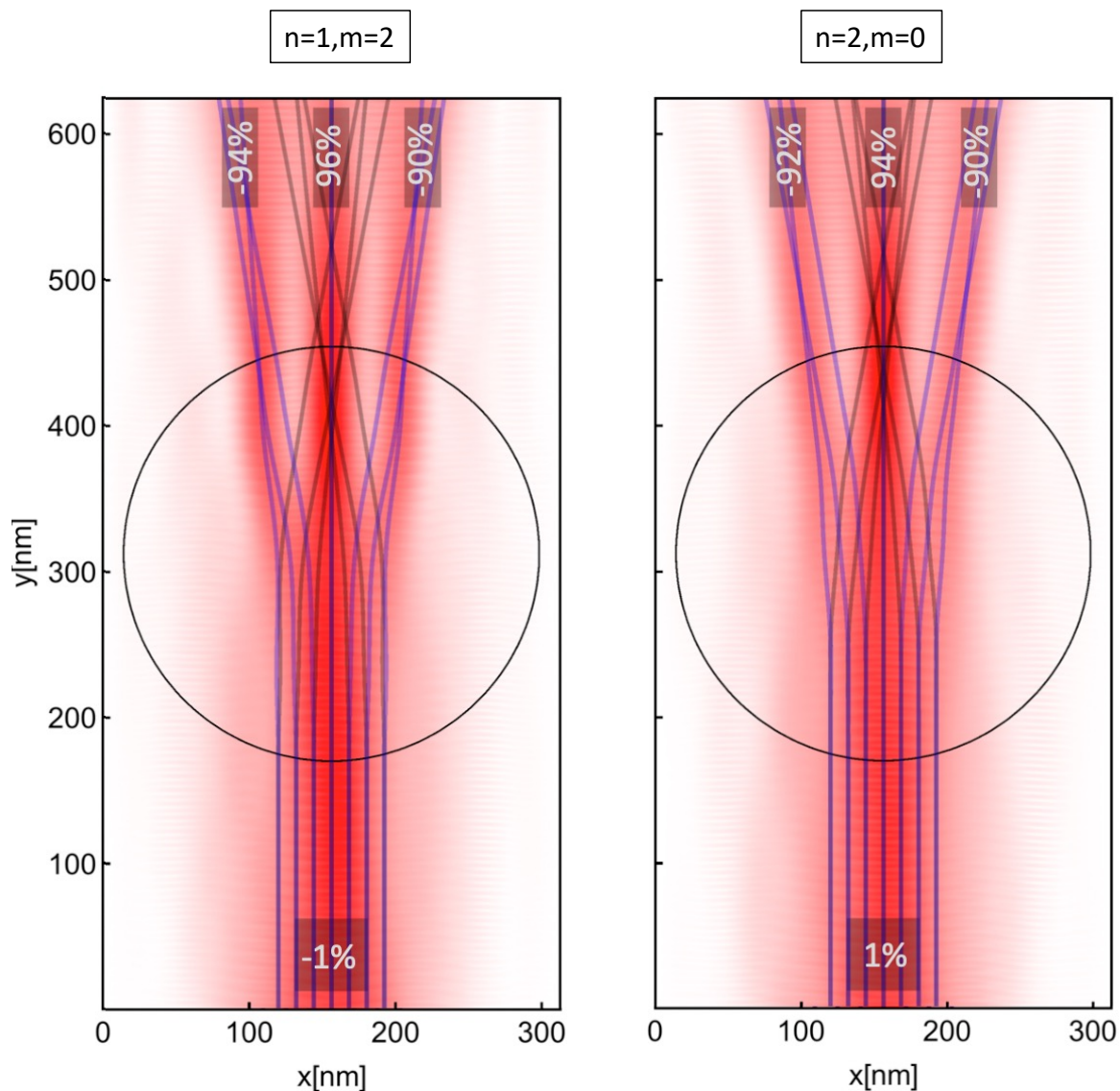


Figura 7.6: Densidad de corriente para los modos  $(1,2)$  y  $(2,0)$  de una membrana circular. El estrés máximo aplicado es 0.2 y 0.13 % respectivamente. Los electrones son inyectados usando el modelo de onda plana con la misma energía que en la figura 7.5. Las trayectorias semiclásicas también acuerdan cualitativamente bien con la densidad de corriente. La polarización  $P_i$  se calcula en los rectángulos grises y los valores se muestran igualmente en porcentajes dentro de cada rectángulo.

7.5 y 7.6, las líneas sólidas negras y azules pertenecen a electrones en los valles  $\mathbf{K}^+$  y  $\mathbf{K}^-$  respectivamente. Estas trayectorias tienen cualitativamente el mismo comportamiento que las densidades de corriente de los electrones y se pueden entender por medio de la fuerza de Lorentz y la interacción de los electrones con el campo pseudo magnético de acuerdo a su espín de valle. La fuerza de Lorentz enfoca los electrones de un valle formando un haz estrecho que atraviesa el sistema y los del otro valle los deflacta a los bordes. Las trayectorias semi clásicas muestran los mismos resultados respecto a la polarización, en las figuras 7.5 y 7.6. Un resultado importante que se logra obtener con este dispositivo es que se puede obtener un haz polarizado en el valle  $\mathbf{K}^+$  enfocado en el centro del sistema y dos haces desviados a los costados con polarización en el valle  $\mathbf{K}^-$ , modos (1,0), (1,2), (2,0), así como un haz con polarización  $\mathbf{K}^-$  enfocado en el centro del sistema y dos haces desviados a los costados con polarización  $\mathbf{K}^+$  para el modo(1,1). Ver figuras 7.5 y 7.6.

### 7.1.2. Inyección en banda ancha

En el modelo de banda ancha los electrones inyectados a  $E = 170\text{meV}$  no tienen un momento  $\mathbf{K}$  específico por lo que el flujo de electrones es disperso, sin embargo aun en este caso el dispositivo permite enfocar una parte de la corriente a lo largo del sistema. Otra parte de la corriente es desviada a los costados manteniendo su dispersión. La polarización en estos sistemas solo fue medida en las partes inferior y superior debido a la alta dispersión que presenta la corriente a los costados. Mediciones de la polarización de valle permiten determinar qué se pueden obtener valores de hasta 84 %, un muy buen valor considerando que la corriente inyectada está completamente dispersa. En las figuras 7.7 y 7.8 se pueden observar los valores de la polarización obtenidos para los cuatro modos utilizados para membranas circulares. Se indican los valores del estrés máximo en cada modo. En general los valores del estrés son mayores pues se necesitan campos pseudo magnéticos más grandes para obtener una buena polarización, sin embargo los valores usados experimentalmente son accesibles. También puede notarse que la energía de los electrones es menor que en el modelo de onda plana, esto para evitar tener que usar valores del estrés aún más grandes.

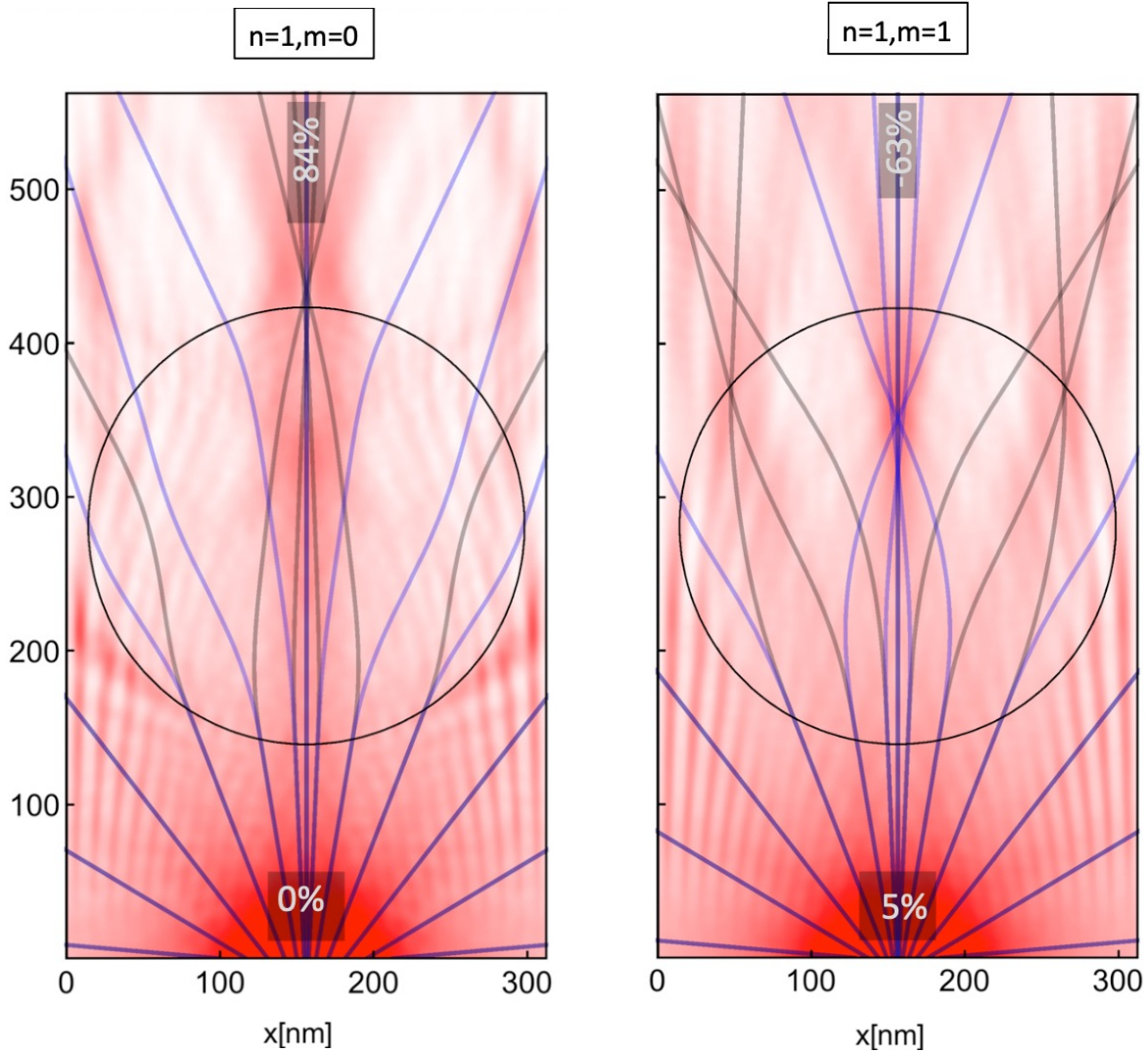


Figura 7.7: Flujo de corriente inyectada utilizando el modelo de banda ancha a  $E = 170\text{meV}$  para los nodos  $(1,0)$  y  $(1,1)$  los valores del strain son  $0.53$  y  $0.42\%$  respectivamente. La densidad de corriente es muy dispersa en comparación con el modelo de onda plana. Las trayectorias semi clásicas para electrones con dispersión se ajustan cualitativamente bien a la densidad de electrones. Los resultados para el cálculo de la polarización se muestran en porcentajes.

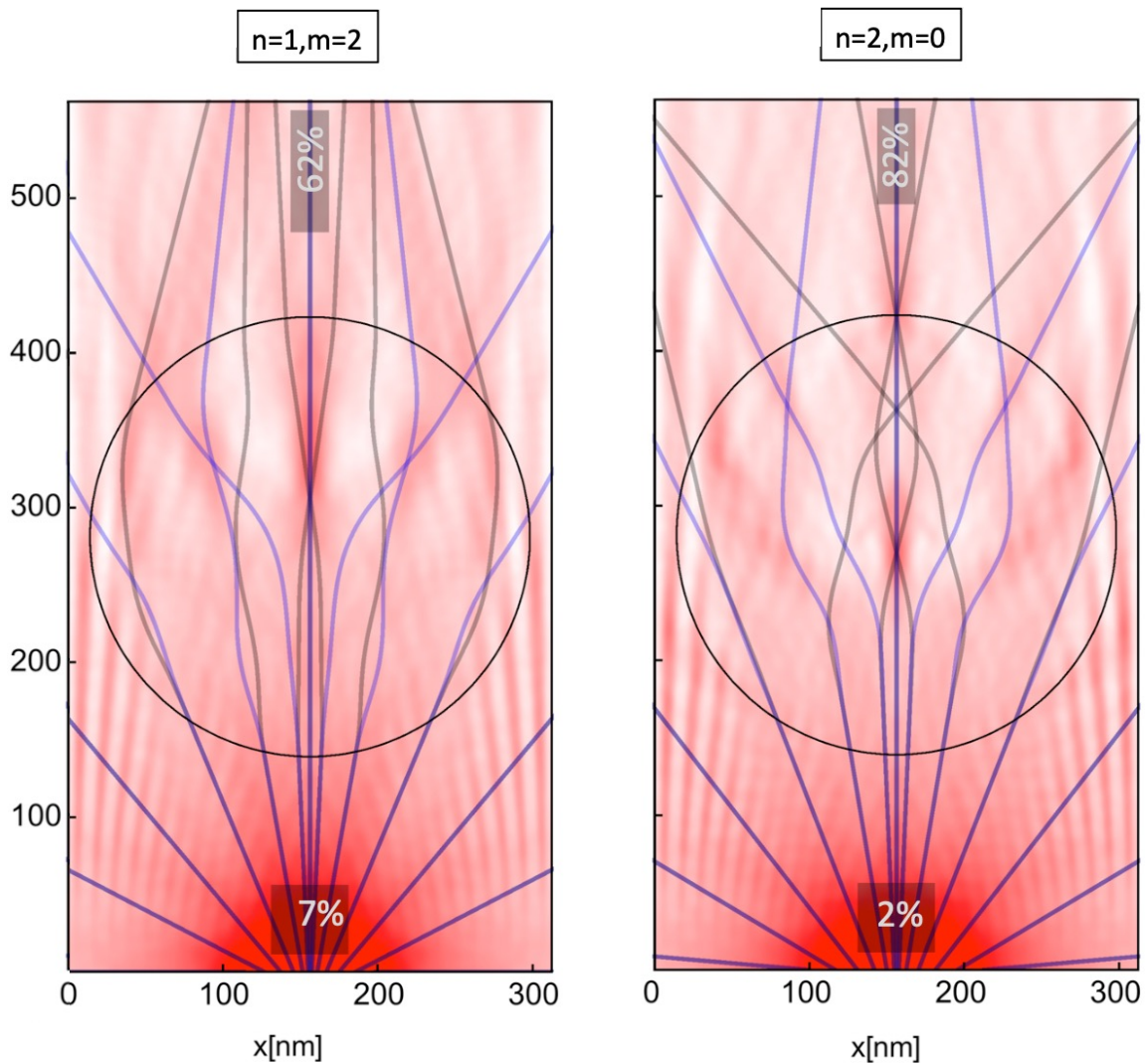


Figura 7.8: Flujo de corriente inyectada utilizando el modelo de banda ancha a  $E = 170\text{meV}$  para los nodos  $(1,2)$  y  $(2,0)$  los valores del strain son  $0.47\%$  y  $0.66\%$  respectivamente. La densidad de corriente es muy dispersa en comparación con el modelo de onda plana. Las trayectorias semi clásicas para electrones con dispersión se ajustan cualitativamente bien a la densidad de electrones. Los resultados para el cálculo de la polarización se muestran en porcentajes.

La energía de los electrones en el estudio de los nano resonadores circulares para el modelo de inyección de onda plana se determinó a partir del análisis de la densidad de polarización, mostrada en la figura 7.9. En esta figura se grafica el valor de la polarización entre 0 y 1 (de

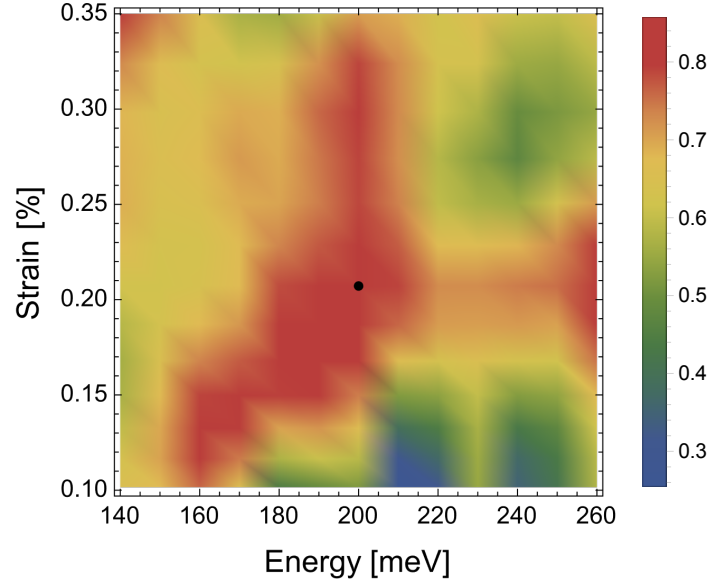


Figura 7.9: Densidad de la polarización de valle como función de la energía y el estrés para un nano resonador circular en el modo (1,0). Los otros parámetros del dispositivo son los mismos que se usaron en la figura 7.5. Las polarizaciones utilizadas para el mapa pertenecen en cada caso al valor medido en el rectángulo central de la parte superior. Los colores de azul a rojo corresponden a valores de 0 a 1 respectivamente. El punto negro indica los parámetros usados en la figura 7.5 modo (1,0). Esta figura muestra que se obtiene una alta polarización para un amplio rango de valores de la energía de los electrones y el estrés (ver zona roja extendida).

azul a rojo), para varios casos del modo (1,0) con valores de energía entre 140meV y 260meV y valores del estrés entre 0.1 % y 0.35 %.

## 7.2. Nano resonadores de grafeno rectangulares

El diseño de nano resonadores con membranas rectangulares es otra propuesta y presenta algunas características particulares. Para nano resonadores rectangulares se utilizaron dos modos propios, mostrados en la figura 7.10. Se muestra el perfil de deformación de los modos (1,1) y (2,2) a un lado la densidad de estrés correspondiente a cada modo. El campo pseudo magnético para ambos modos se muestra en la figura 7.11. Se observa una propiedad importante para este sistema que se da cuando las dimensiones de la membrana cumplen con la relación  $L_y/L_x = \sqrt{3}m/n$ , bajo esta condición la componente y del campo pseudo magnético

es constante. Los resultados obtenidos con este sistema para ambos modelos de inyección son robustos. Una disminución en la relación de hasta un 80 % no genera variaciones importantes en los resultados de la polarización. Ambos campos pseudo magnéticos son constantes en la

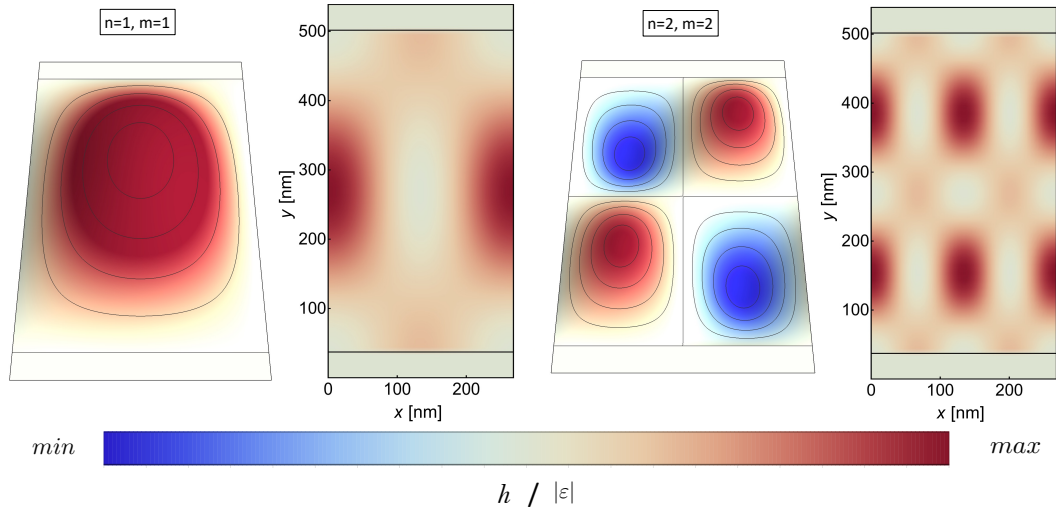


Figura 7.10: Perfil de deformaciones y densidad de estrés de los modos de vibración  $(n, m) = (1, 1)$  y  $(2, 2)$  de la membrana de un nano resonador de grafeno rectangular. Los valores de estrés son 1.53 % y 0.24 % (4.38 % y 6.69 %) para los modos  $(1, 1)$  y  $(2, 2)$  respectivamente para el modelo de inyección de onda plana (banda ancha)

dirección y y se forman dos y cuatro columnas para los modos  $(1, 1)$  y  $(2, 2)$  respectivamente. En la parte central del sistema el signo de los campos está invertido para el modo  $(2, 2)$  respecto al modo  $(1, 1)$ , esto permite polarizar en el valle  $\mathbf{K}^+$  y en el valle  $\mathbf{K}^-$ .

### 7.2.1. Inyección en onda plana

En el modelo de inyección de onda plana para el modo  $(1, 1)$  el estrés máximo requerido es de 1.5 %. Los electrones de un valle son enfocados en un haz estrecho por el centro de las dos columnas de campo, los electrones del otro valle son desviados a los costados. Para el modo  $(2, 2)$  el estrés máximo aplicado fue de 0.24 %. Debido a que ahora tenemos cuatro columnas de campo la densidad de electrones ahora se divide en tres haces estrechos, cada uno enfocado a lo largo de los tres espacios entre las columnas de campo. Los valores medidos para la polarización en este sistema se muestran en porcentajes en la figura 7.12, teniendo haces con muy buena polarización por encima del 80 %. Los resultados para ambos modos son ligeramente mejores que los obtenidos con resonadores circulares sin embargo el estrés

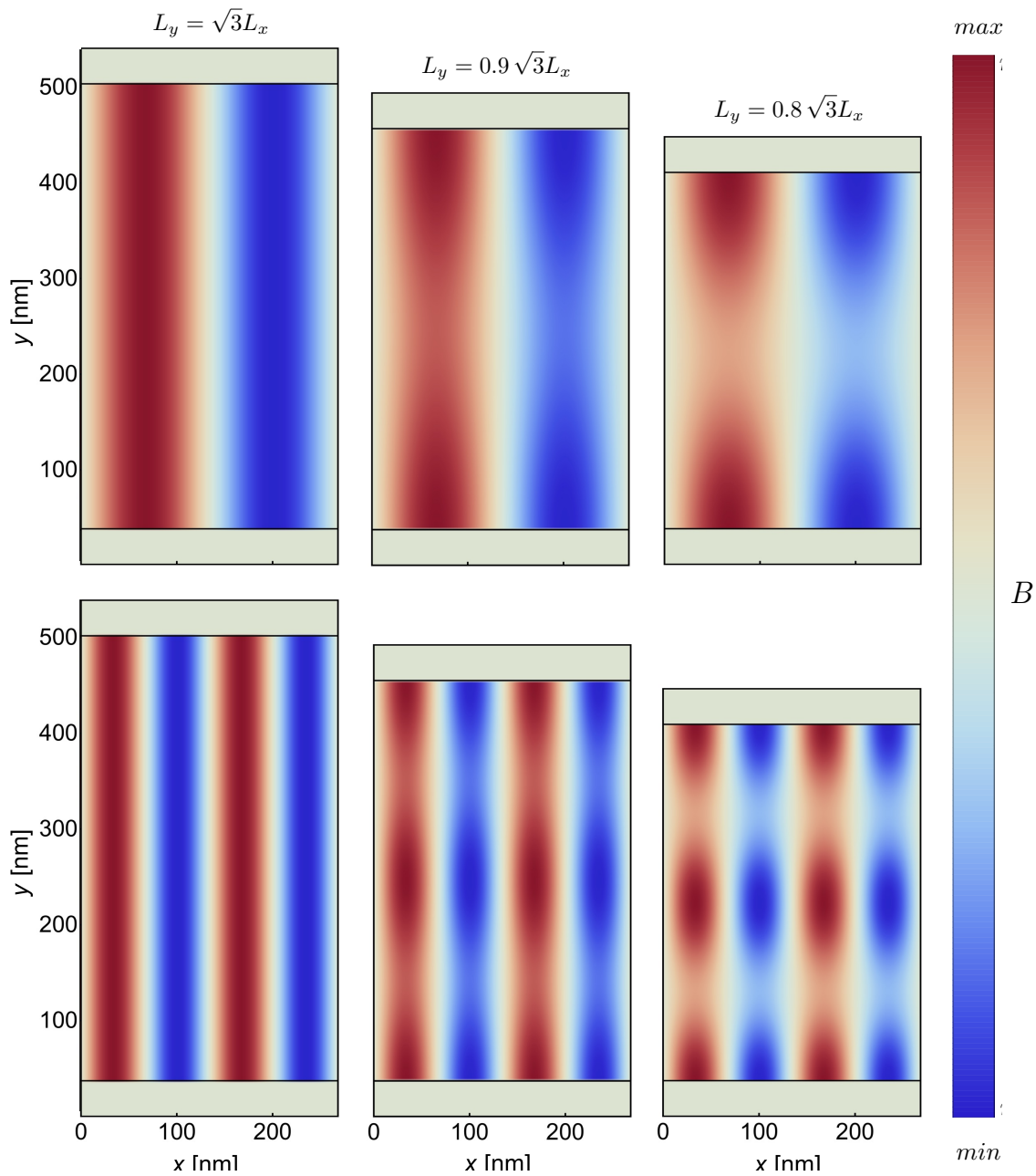


Figura 7.11: Campos pseudo-magnéticos de los modos de vibración  $(n,m) = (1,1)$  y  $(2,2)$ . Se fijó una relación entre las dimensiones del sistema de modo que  $L_y/L_x = \sqrt{3}m/n$ , esto hace que el campo pseudo magnético sea constante en la coordenada  $y$  y formando el patrón de bandas que se observa. El signo alternante del campo pseudo magnético y su patrón en barras permite confinar un haz de electrones de un valle o el otro en el centro. El patrón del campo es robusto ante variaciones en la relación de sus dimensiones

requerido es mayor. El flujo de corriente y los valores de la polarización se mantienen al disminuir la relación  $L_y/L_x = \sqrt{3}m/n$ . Para las trayectorias semiclásicas es interesante notar

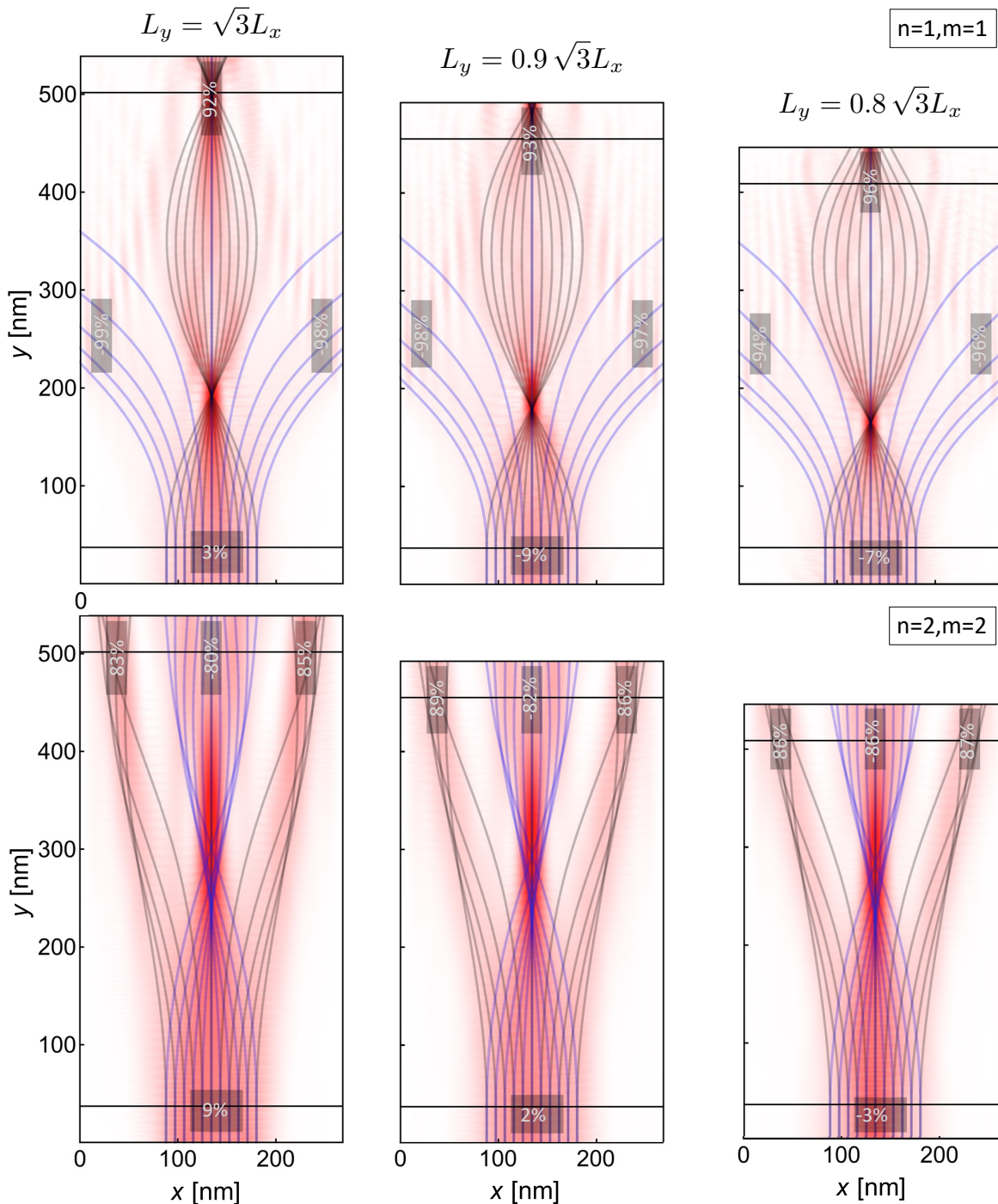


Figura 7.12: Flujo de electrones en una membrana rectangular para los modos  $(n,m) = (1,1)$  y  $(2,2)$ . Los electrones tienen una energía de 200meV. Las líneas horizontales indican dónde inicia y termina la membrana. La polarización de valle se midió en los rectángulos sombreados en gris que se indican, los valores obtenidos se muestran en porcentajes. De izquierda a derecha disminución de la relación  $L_y/L_x = \sqrt{3}m/n$  al 90% y 80%.



que además de ajustarse cualitativamente a la densidad de corriente, los puntos donde se intersecan coinciden con los puntos donde se enfoca el flujo de electrones.

### **7.2.2. Inyección en banda ancha**

En el modelo de Banda ancha los electrones tienen una gran dispersión igual que en los nano resonadores circulares. Los valores de la polarización de valle están entre 90 % y 70 % para los nodos (1, 1) y (2, 2) respectivamente. Para formar haces estrechos en este tipo de membranas con la inyección de banda ancha se requieren valores de estrés más grandes de 4.4 % y 0.35 %. El campo pseudo magnético asociado a estos valores es mayor. Las trayectorias semi clásicas también se ajustan en este caso a la densidad de corriente si se toma en cuenta el momento  $k_x$  que dispersa los electrones. Debido a la intensidad del campo pseudo magnético más puntos de intersección surgen en las trayectorias semi clásicas que coinciden exactamente con los puntos donde se enfoca la densidad de electrones.

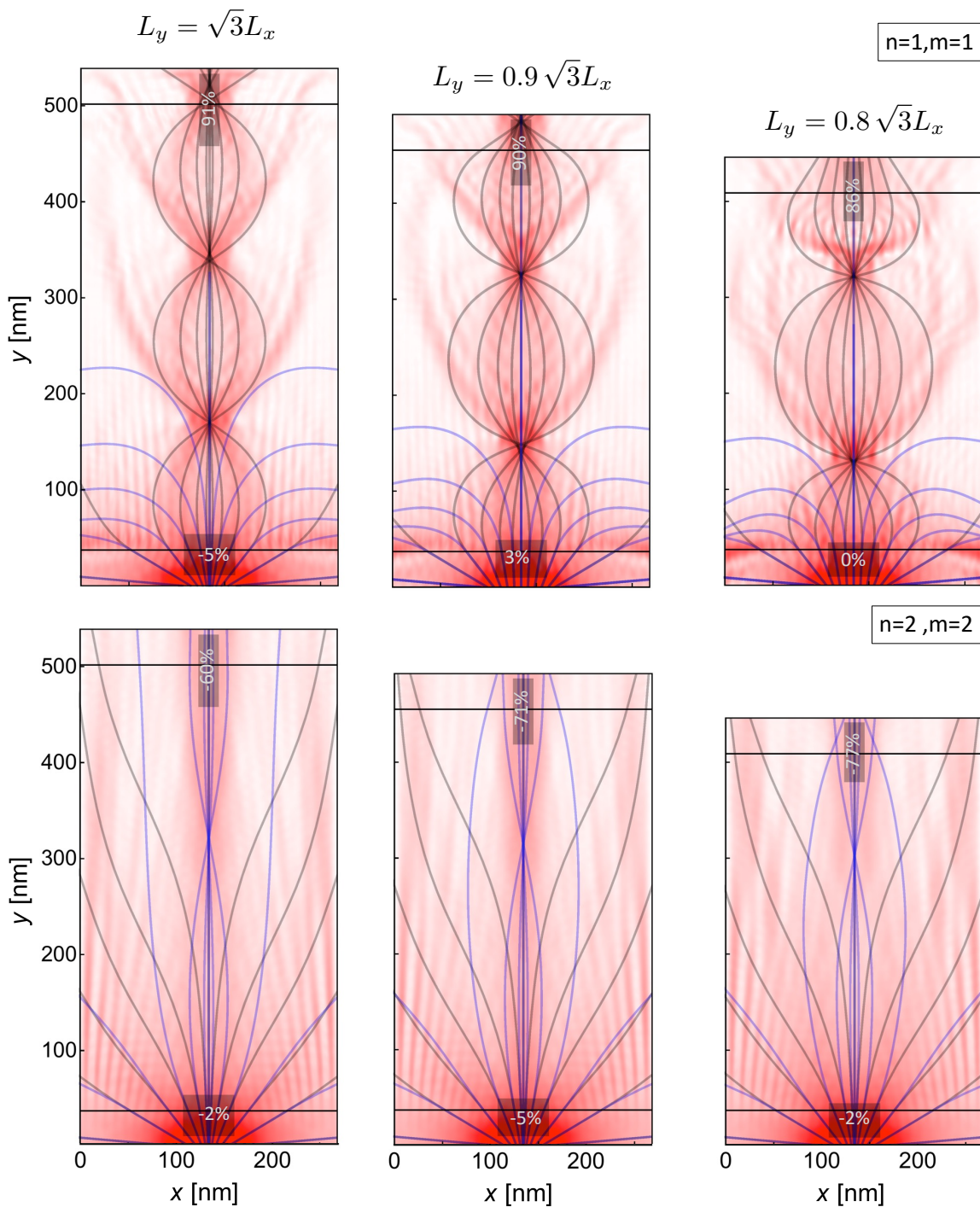


Figura 7.13: Flujo de corriente para el modelo de inyección de banda ancha y trayectorias semi clásicas con dispersión, para los modos (1, 1) y (2, 2). La energía de los electrones es  $E = 170\text{meV}$ . Los valores del estrés son 4.4% y 0.35% respectivamente, el incremento en el estrés se debe a que se requieren campos pseudo magnéticos más grandes debido a la dispersión.

## Nano resonadores con inyección en borde zigzag

En este capítulo se presentan los resultados de la corriente de electrones inyectada en el borde zigzag. En la figura 8.1 se muestra las densidades de corriente para el modelo de inyección de onda plana (a la izquierda) y para el modelo de banda ancha (a la derecha) sin deformación. Los resultados son muy similares a los que se obtienen para la inyección en el borde armchair. Un haz balístico bien definido se obtiene para la inyección de onda plana y un

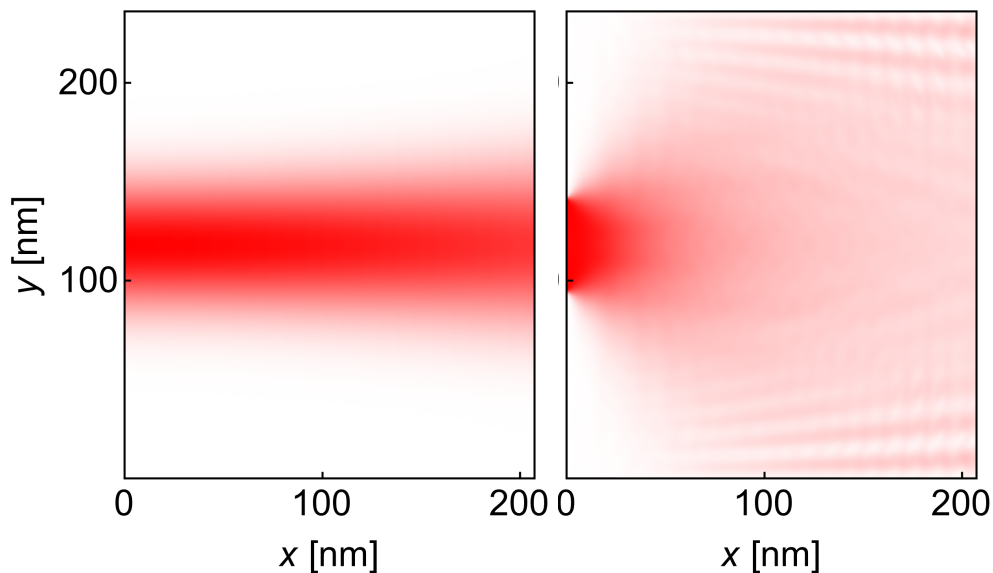


Figura 8.1: Densidades de corriente de electrones (en rojo sombreado) inyectados en el borde Zigzag con una energía de 230meV para los modelos de inyección de onda plana (izquierda) y banda ancha(derecha)

flujo de corriente disperso es obtenido para el modelo de inyección de banda ancha, donde también se observan patrones de interferencia debidos a la interacción con los bordes.

## 8.1. Nano resonadores de grafeno circulares

Se presenta el estudio de un nano resonador circular cuando se inyecta la corriente en el borde zigzag, utilizando los cuatro modos empleados para la inyección en armchair que se muestran en la figura 7.2. En este caso los sistemas tienen una dimensión de  $278 \times 281 \text{nm}$ , la deformación tiene un radio de  $r_0 = 121 \text{nm}$  y los electrones son inyectados con una energía de  $230 \text{meV}$ . Los campos pseudo magnéticos asociados a estas deformaciones son los mismos que se muestran en la figura 7.3

## 8.2. Inyección en onda plana

Las densidades de corriente obtenidas para cada modo se muestran en la figura 8.2. Se puede observar que en cada caso el haz es dividido en dos haces al interactuar con el nano resonador, el haz desviado hacia abajo está polarizado en el valle  $\mathbf{K}^-$  y el haz desviado hacia arriba en el valle  $\mathbf{K}^+$ . Para este tipo de inyección no se realizó un estudio detallado de la polarización respecto a los parámetros de estrés y de energía, los parámetros se eligieron con base en las observaciones realizadas para el caso de inyección en el borde armchair ver figura 6.2. En general se observa que los valores de polarización que se obtienen para los valores de estrés y energía elegidos están alrededor del 90%. La figura 8.2 muestra los valores exactos medidos para la polarización. El porcentaje del estrés ejercido para los modos  $(1,0)$ ,  $(1,1)$ ,  $(1,2)$  y  $(2,0)$  son 0.45%, 0.66%, 1% y 0.46% respectivamente. Los resultados de las mediciones de la polarización con el modelo de inyección de onda plana en el borde zigzag muestran que también es posible utilizar el borde zigzag para obtener haces polarizados con una muy buena polarización dentro de cierto rango de valores de la energía y para valores pequeños del estrés de la deformación.

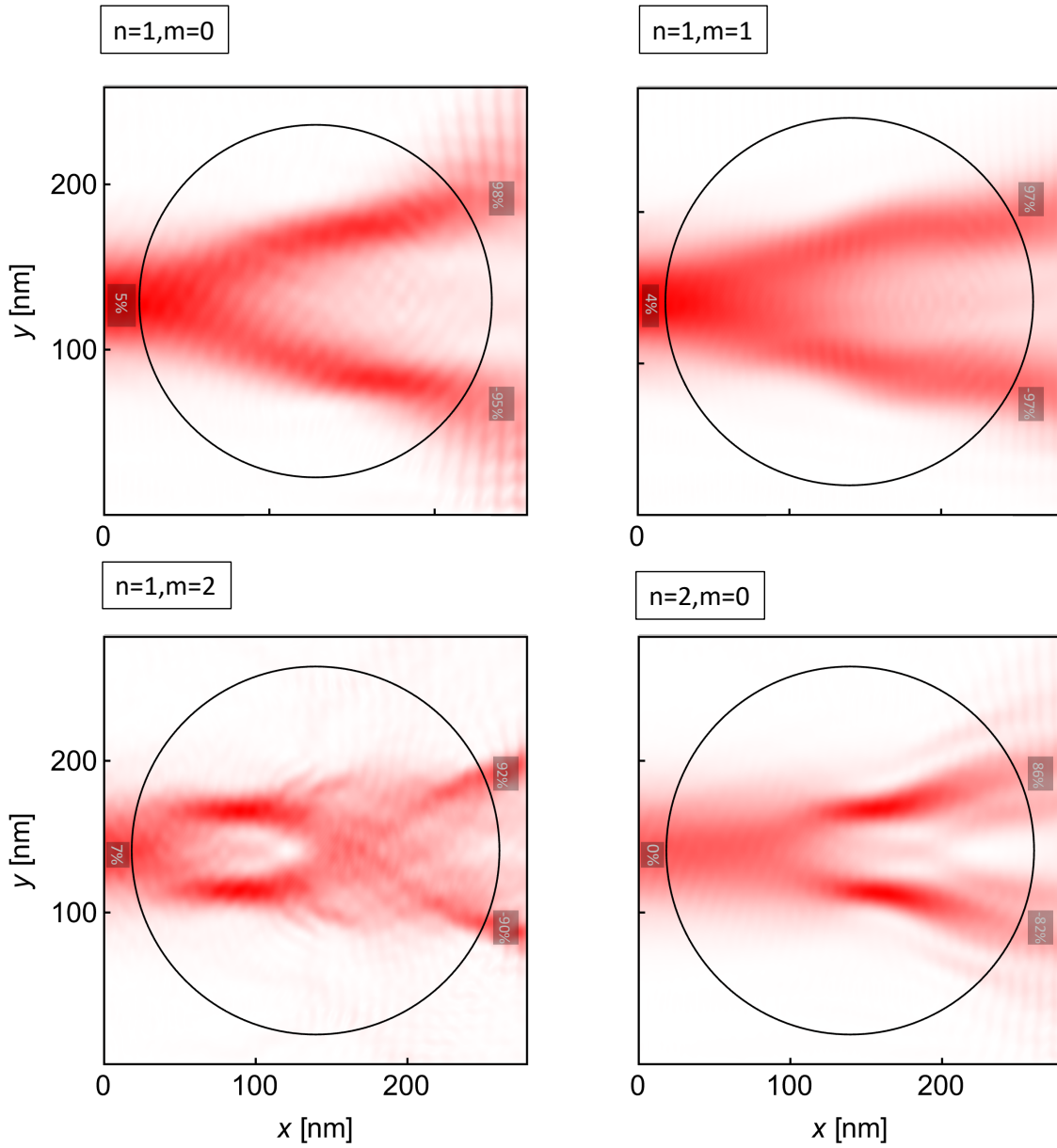


Figura 8.2: Densidades de corriente de electrones (en rojo sombreado) para los modos inyectados en el borde Zigzag con una energía de 230meV para los modelos de inyección de onda plana

### 8.3. Nano resonadores de grafeno rectangulares

En el estudio de la densidad de corriente con inyección en el borde zigzag en nano resonadores de grafeno rectangulares se emplearon cuatro modos de vibración de una membrana rectangular, los modos  $(1,1)$ ,  $(1,2)$ ,  $(2,1)$  y  $(2,2)$ . En la figura 8.3 se muestran el campo pseudo magnético asociados a las deformaciones generadas en cada modo. En cada caso se cumple que  $L_y/L_x = \sqrt{3}m/n$  bajo esta condición la componente  $y$  del campo es constante para cualquier valor de  $n$  y  $m$ . Se puede observar, en general, que  $n$  define el número de bandas en el patrón del campo pseudo magnético. La longitud en  $y$  se modifica de acuerdo al ancho del sistema y al valor de  $m$  de modo que el patrón en bandas se conserve. De las ecuaciones ( 5.2, 5.3 y 5.7 ) se puede ver que el potencial vectorial está relacionado con los mapas de estrés. En la figura 7.10 se aprecian cambios en el mapa de estrés de los modos  $(1,1)$  y  $(2,2)$  lo que implica que el potencial vectorial también cambia a lo largo de la coordenada  $y$ , aun cuando el campo pseudo magnético es constante a lo largo de esta dirección. En particular se puede notar que para  $m = 2$  el patrón se duplica respecto al que se observa para  $m = 1$ , lo anterior puede tener efectos notables sobre la densidad de electrones. En la figura 8.4 se muestra la comparación del campo pseudo magnético con el potencial vectorial para el nodo  $(1,1)$ . Esta figura permite ver cómo cambia el potencial vectorial a lo largo de la coordenada  $y$  en contraste con el campo pseudo magnético que es constante.

#### 8.3.1. Inyección en onda plana

En la figura 8.5 se muestra la densidad de corriente utilizando el modelo de inyección de onda plana en el borde zigzag. Los resultados mostrados corresponden a los cuatro modos de vibración  $(1,1)$ ,  $(1,2)$ ,  $(2,1)$  y  $(2,2)$  de un nano resonador rectangular. Los electrones son inyectados a  $E = 200\text{meV}$  para el modo  $(1,1)$  y se genera la deformación aplicando un estrés de  $4.8\%$  para los modos  $(1,2)$  y  $(2,2)$  la energía es  $E = 250\text{meV}$  y el estrés aplicado es de  $1.3\%$  y  $7.7\%$  respectivamente, para el modo  $(2,1)$   $E = 230\text{meV}$  y el estrés es de  $0.5\%$ . El haz de electrones que incide del lado izquierdo está dividido en dos haces debido a la interacción de los electrones con el campo pseudo magnético de acuerdo a su espín de valle. Los valores de la polarización se muestran en porcentajes en las áreas gris sombreado mismas donde se hizo la medición. Para las mediciones de la polarización se obtienen valores de alrededor del  $99\%$

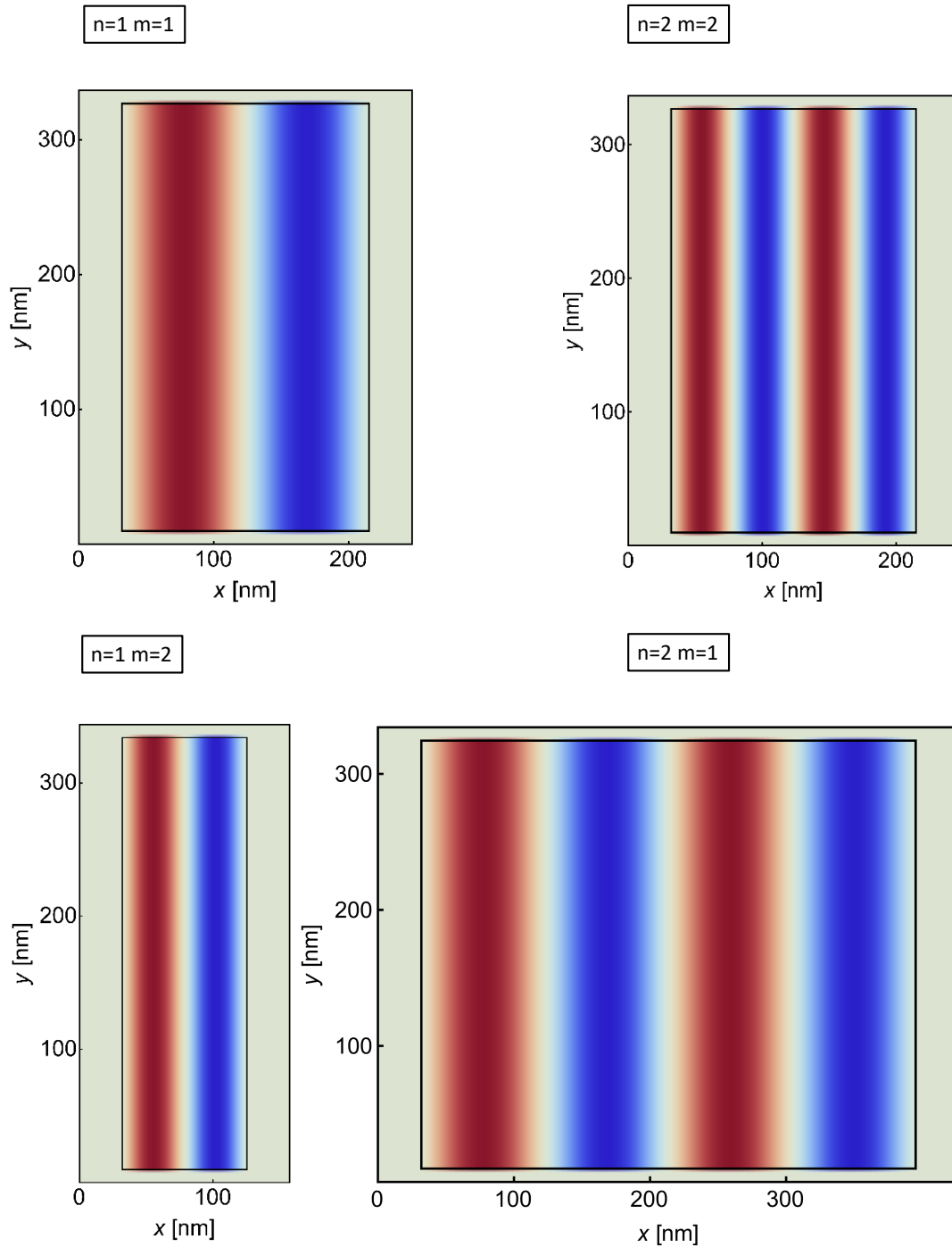


Figura 8.3: Campos pseudo magnéticos para los nodos  $(1, 1)$ ,  $(1, 2)$ ,  $(2, 1)$  y  $(2, 2)$  de un nano resonador rectangular. Para cada sistema se cumple la relación  $L_y/L_x = \sqrt{3}m/n$ , que permite que la componente  $y$  del campo pseudo magnético sea constante para cualquier valor de  $n$  y  $m$ .

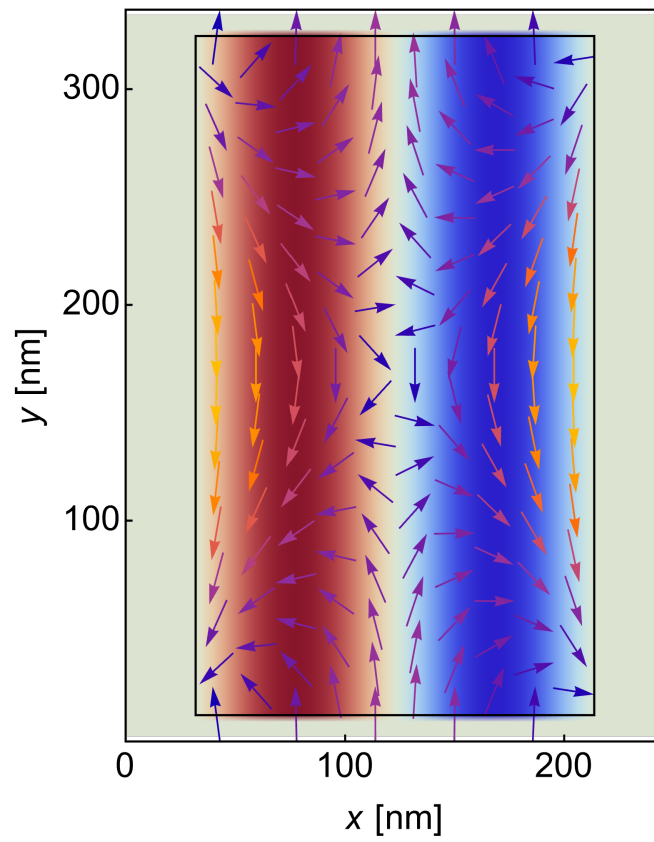


Figura 8.4: Comparación del campo pseudo magnético con el potencial vectorial para el nodo (1, 1) de una nano resonador rectangular



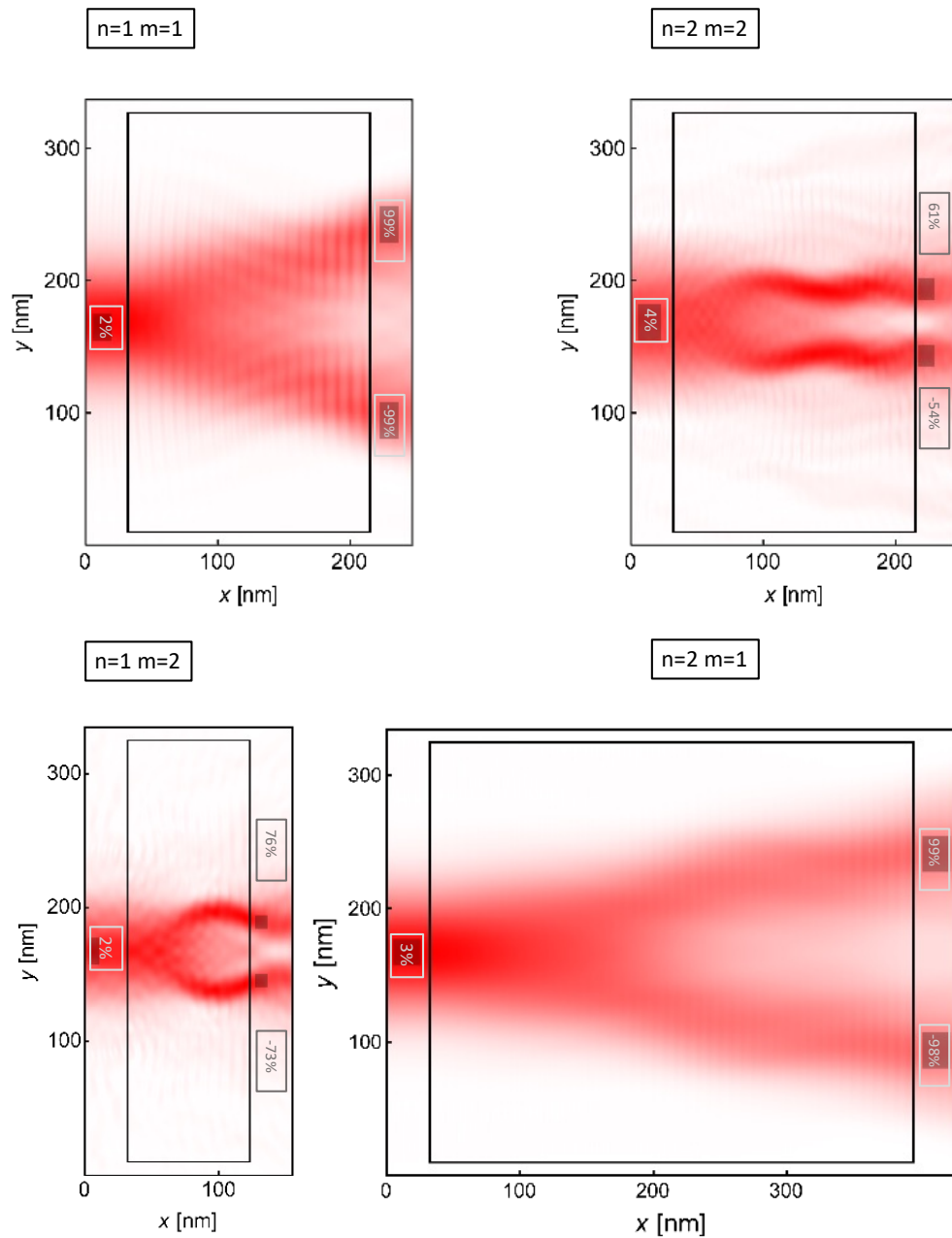


Figura 8.5: Densidad de corriente graficada en rojo sombreado para los nodos (1,1) (1,2) (2,1) (2,2) de un nano resonador rectangular, el flujo de electrones se inyectan del lado izquierdo con el modelo de onda plana en el borde zigzag con  $E = 200\text{meV}$ . Los electrones son colectados del lado derecho. Se muestran los porcentajes de polarización medidos en las zonas gris sombreadas. El rectángulo interior delimita la membrana rectangular donde se aplica la deformación.

en los modos (1, 1) y (2, 1), para el modo (2, 2) la medición de la polarización fue de entre el 50 % y 60 % y para el modo (1, 2) fue superior al 70 %. Nuevamente los porcentajes positivos corresponden a polarizaciones en el valle  $\mathbf{K}^+$  y porcentajes negativos a polarizaciones en el valle  $\mathbf{K}^-$ . En este tipo de inyección los modos en los que  $n = 2$  se forma un patrón de cuatro bandas, lo que permite obtener haces de electrones casi paralelos después de la división de los haces. En particular el modo (2, 1) permite obtener haces con una muy buena polarización, debido probablemente al ancho de las bandas, como pasa con el modo (1, 1). Esto es diferente con los modos (1, 2) y (2, 2) donde el ancho de las bandas de campo pseudo magnético es menor. En estos casos la medición de la polarización no supera el 76 %. Otra observación en este tipo de inyección es que en general es necesario aplicar porcentajes de estrés mayores al 1 % para poder obtener buenos resultados en la polarización. Solo el modo (2, 1) permitió obtener una muy buena polarización con valores del estrés menores al 1 %.

En las siguientes secciones se presentan algunos resultados característicos que se observaron al realizar el estudio de la densidad de la corriente en el sistema propuesto o que están relacionados con los resultados de la medición de la polarización. En la primera parte se presenta el efecto de las asimetrías del potencial vectorial sobre la velocidad de los electrones al inyectar la corriente en el borde zigzag. La segunda sección propone la posibilidad de emplear los nano resonadores en serie con la posibilidad de mejorar el rendimiento del dispositivo. La última sección muestra el efecto de un campo eléctrico externo aplicado perpendicularmente a la dirección de propagación de la corriente.

## **9.1. Asimetrías**

En la figura 8.3 se observa que en general los campos pseudo magnéticos son constantes a lo largo de la dirección  $y$ , sin embargo, el potencial vectorial cambia a lo largo de esta dirección, como se observa en la figura 8.4. Además es importante mencionar que para la inyección en el borde zigzag el campo vectorial presenta un cambio abrupto de cero (en la región sin deformación) a un valor finito (en la región de la deformación). Esta drástica transición causa un campo pseudo magnético muy fuerte. Estos cambios tienen consecuencias sobre la densidad de corriente. En la figura 9.1 se muestran el efecto de los cambios en el potencial vectorial sobre el haz de electrones para el modo  $(2, 1)$ , se observa una asimetría en la densidad de la corriente cuando el haz es inyectado en la parte inferior o superior del sistema. Esta asimetría afecta los resultados de la medición de la polarización, por lo que es un factor importante a considerar para el caso de la inyección en el borde zigzag. Otros factores

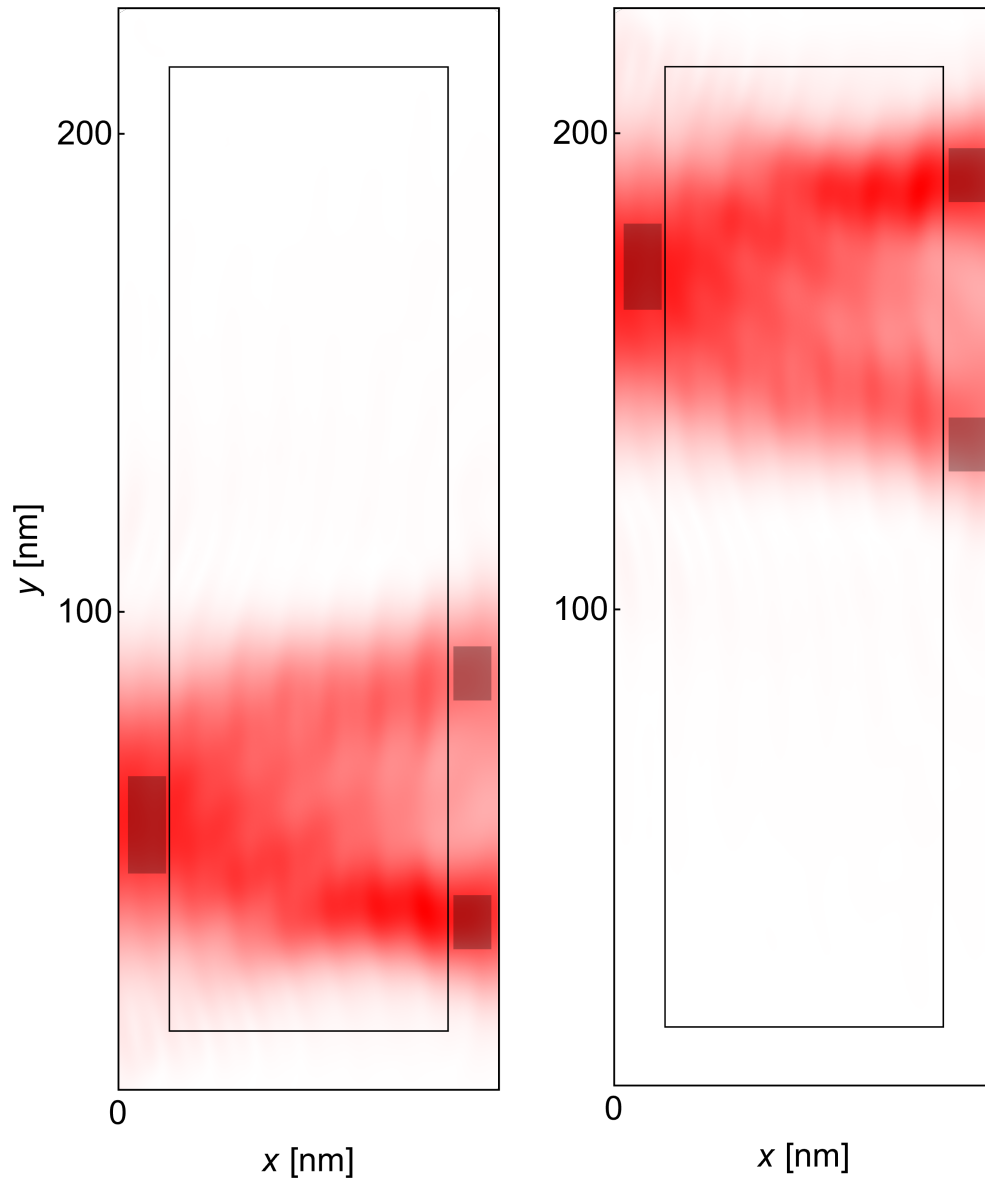


Figura 9.1: Densidad de la corriente de un haz de electrones inyectado con una energía de  $200\text{meV}$  en una membrana rectangular con el modo  $(2, 1)$  bajo un estrés máximo de  $0.46\%$ . (a) cuando el centro del haz está ubicado en  $Lx/4$ , (b) el centro del haz está ubicado en  $3Lx/4$ .

pueden generar asimetrías en la densidad de la corriente, sin embargo para el caso presentado en esta sección no es tan evidente debido a que el campo pseudo magnético es uniforme.

## 9.2. Nano resonadores en serie

La figura 9.2 muestra el resultado obtenido para la densidad de corriente inyectada con el modelo de banda ancha en el borde armchair con una energía de 170meV. La corriente de electrones atraviesa el sistema e interactúa con tres nano resonadores circulares en el modo  $(1,0)$  de radio  $r = 70\text{nm}$  colocados en serie, con un estrés de 0.63 %. Se observa que el flujo de corriente inyectado es muy disperso y al pasar por los nano resonadores se va enfocando en la dirección de propagación de los electrones. El sistema funciona como un colimador de haces. Se señala el valor de la polarización del haz de electrones en los recuadros grises donde

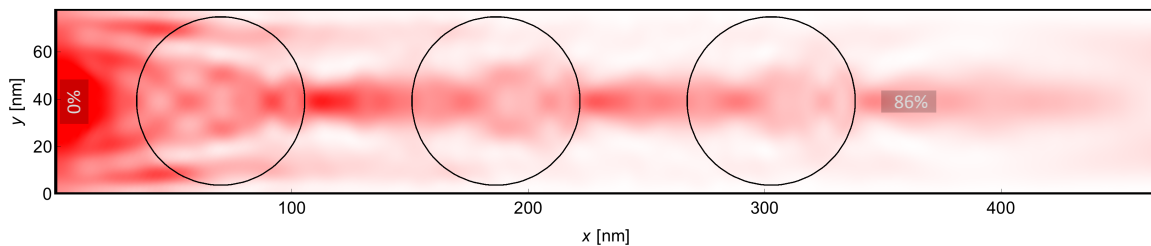


Figura 9.2: Densidad de electrones inyectados en el borde armchair con un energía de 170meV con el modelo de banda ancha. Tres nano resonadores en serie permiten obtener un haz de electrones bien definido a partir de un haz completamente disperso. El estrés máximo aplicado sobre los nano resonadores es de 0.63 %. Cada nano resonador está en el modo  $(1,0)$ . La inyección del haz de electrones es en el borde armchair (la imagen está rotada  $90^\circ$ ).

fue medida. Del lado izquierdo donde inciden los electrones la medición es 0% y del lado derecho justo después de pasar por los tres nano resonadores la polarización es de 86% un valor bastante bueno para la medición de la polarización en el modelo de banda ancha y que sugiere que utilizar nano resonadores en serie en general permite obtener un haz colimado y con una mejor polarización que si se emplea un solo nano resonador.

## 9.3. Efecto del campo pseudo eléctrico

Una observación que se puede hacer al presente trabajo y que se aborda en esta sección es que al aplicar la deformación y generar los campos pseudo magnéticos también se genera un

campo pseudo eléctrico que no ha sido considerado y que en principio podría modificar los resultados de la densidad de corriente. Considerando que el máximo del potencial vectorial sea de  $|A_{max}| \approx 40\text{Tnm}$ . Al tomar frecuencias de vibración muy altas,  $\omega = 1\text{GHz}$ , la magnitud del campo pseudo eléctrico se puede estimar que sea  $E_{max} \approx \omega * |A_{max}| \approx 40\text{V/m}$ , lo que implica un pseudo voltaje de  $V_{max} \approx E_{max} * 2r \approx 12\mu\text{V}$ . En la figura 9.3 se muestra el resultado de agregar un campo eléctrico constante en la dirección  $x$  como una simplificación del efecto que tendría el campo pseudo eléctrico generado. El voltaje aumenta de  $0.4\text{mV}$  hasta los  $19.8\text{mV}$ . Se observa que a medida que aumenta la intensidad del campo los electrones son deflectados

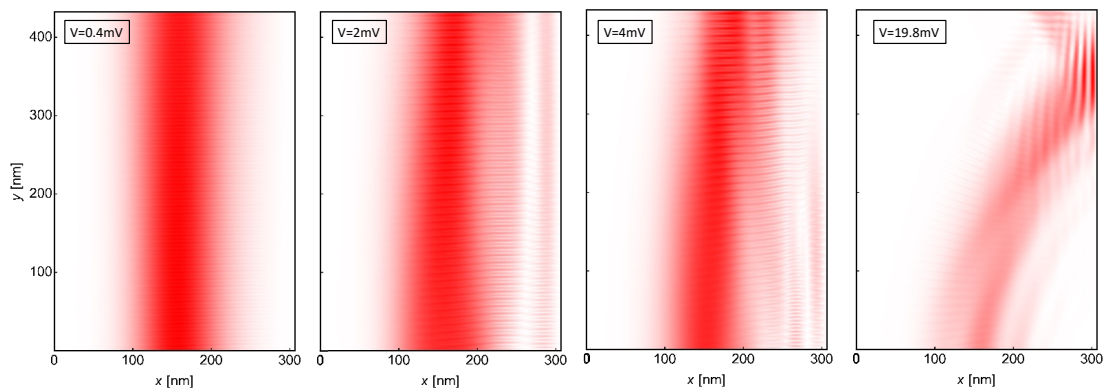


Figura 9.3: Estudio del efecto de un campo eléctrico uniforme sobre la densidad de corriente inyectada en el borde armchair. El campo eléctrico se aplica a lo largo del eje  $x$ . En la esquina superior izquierda se muestra el voltaje correspondiente a cada campo. De izquierda a derecha el voltaje aumenta de  $0.4\text{mV}$  a  $19.8\text{mV}$

en la dirección en la que el campo eléctrico es aplicado. Es importante notar que incluso el valor más pequeño del voltaje utilizado es grande en comparación con las magnitudes de los voltajes obtenidos para un campo pseudo eléctrico producido por la deformación. Por lo anterior se puede determinar que el campo pseudo eléctrico que se genera en el sistema propuesto no implica alguna desventaja ni modificaría los resultados del estudio.

# 10

 | 

## Conclusiones

En este trabajo se analizó la eficiencia de los nano resonadores mecánicos de grafeno, sistemas que permiten separar y polarizar un flujo de electrones. Estos dispositivos están formados por una cinta de grafeno colocada sobre un sustrato con un hueco, formando una membrana. Es posible tener diferentes tipos de membranas al modificar la geometría de la cavidad. Dos tipos de geometrías fueron empleadas en este estudio, circular y rectangular. El flujo de electrones es inyectado en un borde de la cinta por medio de un contacto fuente y es recolectado en el borde opuesto en un contacto de drenaje. Dos tipos diferentes de bordes (armchair y zigzag) característicos de una cinta de grafeno fueron tomados en cuenta para la inyección de la corriente, de los cuales se pudo determinar que la inyección por el borde armchair tiene algunas ventajas y permite obtener en general mejores resultados. Se demostró que es posible, en teoría, construir un polarizador del espín de valle muy eficiente. Para un nano tambor circular de grafeno se logró esto con valores del estrés entre 0.1 y 0.6%, obteniendo haces de electrones altamente polarizados. El dispositivo funciona para el modelo de inyección de onda plana así como para el modelo de banda ancha. En el primero los electrones son inyectados en un haz balístico angosto. En el segundo los electrones son inyectados de forma completamente dispersa, en este modelo es necesario utilizar valores del estrés mayores y por lo tanto campos pseudo-magnéticos más intensos. En el caso del modelo de inyección de banda ancha además de lograr una buena polarización, la densidad de electrones se pueden enfocar formando un haz estrecho enfocado en una dirección en particular actuando como colimador. Para los nano resonadores rectangulares se encontró que para una relación particular entre las dimensiones del sistema  $L_y/L_x = \sqrt{3}m/n$  donde  $n$  y  $m$  definen el modo de vibración  $(m,n)$  de la membrana, el campo pseudo-magnético se hace

constante a lo largo de la dirección y formando líneas de campo alternadas en signo y en pares de acuerdo a los valores de  $n$  y  $m$ . Para la inyección en el borde armchair este patrón permite confinar los electrones de un valle u otro en el centro de dos líneas de campo. Las trayectorias semi clásicas concuerdan bien con la densidad de corriente calculada con el método de funciones de Green. Sobre todo es interesante remarcar que los puntos de enfocamiento de ambos modelos coinciden perfectamente. Este modelo es una herramienta computacional muy eficiente para predecir el flujo de corriente en sistemas de grafeno, sobre todo en sistemas muy grandes donde para otros modelos se hace imposible realizar los cálculos. Permitiendo predecir el comportamiento de resonadores más grandes. Para poder realizar estos dispositivos experimentalmente, es necesario generar cintas de grafeno de muy alta calidad. Imperfecciones en la red e interacciones con el substrato podrían afectar el funcionamiento del dispositivo como se presenta al reducir la trayectoria libre media y la movilidad de los electrones. Sin embargo se ha mostrado también que teóricamente el dispositivo es robusto ante variaciones lo que debería permitir conservar buenos resultados, ya que el campo pseudo magnético reenfoca los electrones. Un obstáculo que se puede presentar al momento de fabricar estos dispositivos es que el campo pseudo magnético no es invariante ante rotaciones por lo que la orientación de la cinta de grafeno respecto a los contactos es muy importante y debe ser exacta al momento de su fabricación.



# Bibliografía

- [1] DSL Abergel et al. «Properties of graphene: a theoretical perspective». En: *Advances in Physics* Vol. 59. No. 4 (2010), págs. 261-482.
- [2] Deji Akinwande et al. «A review on mechanics and mechanical properties of 2D materials—Graphene and beyond». En: *Extreme Mechanics Letters* Vol. 13 (2017), págs. 42-77.
- [3] Roberto De Alba et al. «Tunable phonon-cavity coupling in graphene membranes». En: *Nature Nanotechnology* Vol. 11. No. 9 (jun. de 2016), págs. 741-746.
- [4] Juan Atalaya, Andreas Isacsson y Jari M Kinaret. «Continuum elastic modeling of graphene resonators». En: *Nano letters* Vol. 8. No. 12 (2008), págs. 4196-4200.
- [5] Robert A. Barton et al. «High, Size-Dependent Quality Factor in an Array of Graphene Mechanical Resonators». En: *Nano Letters* Vol. 11. No. 3 (mar. de 2011), págs. 1232-1236.
- [6] Yonatan Betancur-Ocampo, François Leyvraz y Thomas Stegmann. «Electron Optics in Phosphorene pn Junctions: Negative Reflection and Anti-Super-Klein Tunneling». En: *Nano Lett.* Vol. 19. No. 11 (sep. de 2019), pág. 7760.
- [7] Yonatan Betancur-Ocampo, Emmanuel Paredes-Rocha y Thomas Stegmann. «Phosphorene pnp junctions as perfect electron waveguides». En: *Journal of Applied Physics* Vol. 128. No. 11 (sep. de 2020), pág. 114303.
- [8] M. Annamalai C. L. Wong, Z. Q. Wang y M. Palaniapan. «Characterization of nano-mechanical graphene drum structures». En: *Journal of Micromechanics and Microengineering* Vol. 20. No. 11 (oct. de 2010), pág. 115029.
- [9] Ramon Carrillo-Bastos et al. «Enhanced asymmetric valley scattering by scalar fields in nonuniform out-of-plane deformations in graphene». En: *Physical Review B* 98. No. 16 (oct. de 2018), pág. 165436.

- [10] Ramon Carrillo-Bastos et al. «Strained fold-assisted transport in graphene systems». En: *Physical Review B* Vol. 94. No. 12 (sep. de 2016), pág. 125422.
- [11] Andres Castellanos-Gomez et al. «Mechanics of freely-suspended ultrathin layered materials». En: *Annalen der Physik* Vol. 527. No. 1-2 (oct. de 2014), págs. 27-44.
- [12] Changyao Chen y J. Hone. «Graphene nanoelectromechanical systems». En: *Proceedings of the IEEE* Vol. 101. No. 7 (jul. de 2013), págs. 1766-1779.
- [13] Changyao Chen et al. «Graphene mechanical oscillators with tunable frequency». En: *Nature Nanotechnology* Vol. 8. No. 12 (nov. de 2013), págs. 923-927.
- [14] Changyao Chen et al. «Performance of monolayer graphene nanomechanical resonators with electrical readout». En: *Nature Nanotechnology* Vol. 4. No.12 (sep. de 2009), págs. 861-867.
- [15] Chul Chung et al. «Biomedical applications of graphene and graphene oxide». En: *Accounts of chemical research* Vol. 46. No. 10 (2013), págs. 2211-2224.
- [16] Daniel R Cooper et al. «Experimental review of graphene». En: *International Scholarly Research Notices* 2012 (2012), pág. 501686.
- [17] Zhaohe Dai, Luqi Liu y Zhong Zhang. «Strain Engineering of 2D Materials: Issues and Opportunities at the Interface». En: *Advanced Materials* Vol. 31. No. 45 (ene. de 2019), pág. 1805417.
- [18] Supriyo Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, 1997.
- [19] Supriyo Datta. *Quantum Transport: Atom to Transistor*. Cambridge University Press, 2005.
- [20] Dejan Davidovikj et al. «On-chip Heaters for Tension Tuning of Graphene Nanodrums». En: *Nano Letters* Vol. 18. No. 5 (abr. de 2018), págs. 2852-2858.
- [21] Dejan Davidovikj et al. «Visualizing the Motion of Graphene Nanodrums». En: *Nano Letters* Vol. 16. No. 4 (mar. de 2016), págs. 2768-2773.
- [22] Axel Martin Eriksson et al. «Frequency tuning, nonlinearities and mode coupling in circular mechanical graphene resonators». En: *Nanotechnology* Vol. 24. No. 39 (2013), pág. 395702.

- [23] D. Faria et al. «Valley polarization braiding in strained graphene». En: *Physical Review B* Vol. 101. No. 8 (feb. de 2020), pág. 081410.
- [24] Alexander Georgi et al. «Tuning the Pseudospin Polarization of Graphene by a Pseudomagnetic Field». En: *Nano Letters* Vol. 17. No. 4 (mar. de 2017), págs. 2240-2245.
- [25] J.N. Fuchs M. O. Goerbig. «Introduction to the Physical Properties of Graphene». En: (2008).
- [26] Francisco Guinea, Mikhail I. Katsnelson y A. K. Geim. «Energy gaps and a zero-field quantum Hall effect in graphene by strain engineering». En: *Nat Phys* Vol. 6. No. 1 (ene. de 2010), págs. 30-33.
- [27] Johannes Güttinger et al. «Energy-dependent path of dissipation in nanomechanical resonators». En: *Nature Nanotechnology* Vol. 12. No. 7 (mayo de 2017), págs. 631-636.
- [28] Pengfei Jia et al. «Programmable graphene nanobubbles with three-fold symmetric pseudo-magnetic fields». En: *Nature Communications* Vol. 10. No. 1 (jul. de 2019), pág. 3127.
- [29] Fernando de Juan, Juan L. Mañes y Maria A. H. Vozmediano. «Gauge fields from strain in graphene». En: *Phys. Rev. B* Vol. 87. No. 16 (abr. de 2013), pág. 165131.
- [30] Fernando de Juan, Mauricio Sturla y Maria A. H. Vozmediano. «Space Dependent Fermi Velocity in Strained Graphene». En: *Phys. Rev. Lett.* Vol. 108. No. 22 (mayo de 2012), pág. 227205.
- [31] Zulfiqar H Khan et al. «Mechanical and electromechanical properties of graphene and their potential application in MEMS». En: *Journal of Physics D: Applied Physics* Vol. 50. No. 5 (ene. de 2017), pág. 053003.
- [32] M.-K. Lee et al. «Valley-based field-effect transistors in graphene». En: *Physical Review B* Vol. 86. No. 16 (oct. de 2012), pág. 165411.
- [33] Martin Lee et al. «Sealing Graphene Nanodrums». En: *Nano Letters* Vol. 19. No. 8 (jul. de 2019), págs. 5313-5318.
- [34] Sunwoo Lee et al. «Electrically integrated SU-8 clamped graphene drum resonators for strain engineering». En: *Applied Physics Letters* Vol. 102. No. 15 (abr. de 2013), pág. 153101.

- [35] Thomas Lehmann et al. «Time-dependent framework for energy and charge currents in nanoscale systems». En: *Chemical Physics* Vol. 514 (oct. de 2018), págs. 176-182.
- [36] Max C. Lemme et al. «Nanoelectromechanical Sensors Based on Suspended 2D Materials». En: *Research* 2020 (jul. de 2020), págs. 1-25.
- [37] Xinghui Liu et al. «Large Arrays and Properties of 3-Terminal Graphene Nanoelectromechanical Switches». En: *Advanced Materials* Vol. 26. No. 10 (dic. de 2013), págs. 1571-1576.
- [38] Md Tareq Mahmud y Nancy Sandler. «Emergence of strain-induced moiré patterns and pseudomagnetic field confined states in graphene». En: *Physical Review B* Vol. 102. No. 23 (dic. de 2020), pág. 235410.
- [39] M. I. Katsnelson Maria AH Vozmediano y Francisco Guinea. «Gauge fields in graphene». En: *Physics Reports* Vol. 496. No. 4-5 (nov. de 2010), págs. 109-148.
- [40] John P. Mathew et al. «Dynamical strong coupling and parametric amplification of mechanical modes of graphene drums». En: *Nature Nanotechnology* Vol. 11. No. 9 (jun. de 2016), págs. 747-751.
- [41] David Miller y Benjamin Alemán. «Spatially resolved optical excitation of mechanical modes in graphene NEMS». En: *Applied Physics Letters* Vol. 115. No. 19 (nov. de 2019), pág. 193102.
- [42] S. P. Milovanović y F. M. Peeters. «Strain controlled valley filtering in multi-terminal graphene structures». En: *Applied Physics Letters* Vol. 109. No. 20 (nov. de 2016), pág. 203108.
- [43] M. S. Mrudul et al. «Light-induced valleytronics in pristine graphene». En: *Optica* Vol. 8. No. 3 (mar. de 2021), págs. 422-427.
- [44] Gerardo G Naumis et al. «Electronic and optical properties of strained graphene and other strained 2D materials: a review». En: *Reports on Progress in Physics* Vol. 80. No. 9 (ago. de 2017), pág. 096501.
- [45] Péter Nemes-Incze et al. «Preparing local strain patterns in graphene by atomic force microscope based indentation». En: *Scientific Reports* Vol. 7. No. 1 (jun. de 2017), pág. 3035.

- [46] A.H. Castro Neto et al. «The electronic properties of graphene». En: *Rev. Mod. Phys.* Vol. 81. No. 1 (ene. de 2009), págs. 109-162.
- [47] P. Nigge et al. «Room temperature strain-induced Landau levels in graphene on a wafer-scale platform». En: *Science Advances* Vol. 5. No. 11 (nov. de 2019), eaaw5593.
- [48] M. Oliva-Leyva y Gerardo G. Naumis. «Generalizing the Fermi velocity of strained graphene from uniform to nonuniform strain». En: *Phys. Lett. A* Vol. 379. No. 40-41 (oct. de 2015), págs. 2645-2651.
- [49] Felix von Oppen, Francisco Guinea y Eros Mariani. «Synthetic electric fields and phonon damping in carbon nanotubes and graphene». En: *Phys. Rev. B* Vol. 80 ( No. 7 ago. de 2009), pág. 075420.
- [50] Emmanuel Paredes-Rocha et al. «Gradient-index electron optics in graphene p-n junctions». En: *Physical Review B* Vol. 103. No. 4 (ene. de 2021), pág. 045404.
- [51] Vitor M. Pereira, A. H. Castro Neto y N. M. R. Peres. «Tight-binding approach to uniaxial strain in graphene». En: *Phys. Rev. B* Vol.80. No. 4 (jul. de 2009), pág. 045401.
- [52] Bogdan Stefan Popescu y Alexander Croy. «Efficient auxiliary-mode approach for time-dependent nanoelectronics». En: *New Journal of Physics* Vol. 18. No. 9 (sep. de 2016), pág. 093044.
- [53] R M Ribeiro et al. «Strained graphene: tight-binding and density functional calculations». En: *New Journal of Physics* Vol. 11. No. 11 (nov. de 2009), pág. 115002.
- [54] Novoselov Kostya S. et al. «Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films». En: *Science* Vol. 306. No. 5696 (2004), págs. 666-669.
- [55] John R. Schaibley et al. «Valleytronics in 2D materials». En: *Nat. Rev. Mat.* Vol. 1. No. 11 (ago. de 2016), pág. 16055.
- [56] Eran Sela et al. «Quantum Hall Response to Time-Dependent Strain Gradients in Graphene». En: *Phys. Rev. Lett.* Vol. 124 ( No. 2 ene. de 2020), pág. 026602.
- [57] Mikkel Settnes et al. «Graphene Nanobubbles as Valley Filters and Beam Splitters». En: *Physical Review Letters* Vol. 117. No. 27 (dic. de 2016), pág. 276801.

- [58] Yuyan Shao et al. «Graphene based electrochemical sensors and biosensors: a review». En: *Electroanalysis: An International Journal Devoted to Fundamental and Practical Aspects of Electroanalysis* Vol. 22. No. 10 (2010), págs. 1027-1036.
- [59] Fu-Tao Shi et al. «Opto-thermally Excited Fabry-Perot Resonance Frequency Behaviors of Clamped Circular Graphene Membrane». En: *Nanomaterials* Vol. 9. No. 4 (2019), pág. 563.
- [60] Yuyoung Shin et al. «Raman spectroscopy of highly pressurized graphene membranes». En: *Applied Physics Letters* Vol. 108. No. 22 (mayo de 2016), pág. 221907.
- [61] Anderson D. Smith et al. «Piezoresistive Properties of Suspended Graphene Membranes under Uniaxial and Biaxial Strain in Nanoelectromechanical Pressure Sensors». En: *ACS Nano* Vol. 10. No. 11 (nov. de 2016), págs. 9879-9886.
- [62] Fionnuala Solomon y Stephen R. Power. «Valley current generation using biased bilayer graphene dots». En: *Physical Review B* Vol. 103. No. 23 (jun. de 2021), pág. 235435.
- [63] Thomas Stegmann y Nikodem Szpak. «Current flow paths in deformed graphene: from quantum transport to classical trajectories in curved space». En: *New J. Phys.* Vol. 18. No. 5 (mayo de 2016), pág. 053016.
- [64] Thomas Stegmann y Nikodem Szpak. «Current splitting and valley polarization in elastically deformed graphene». En: *2D Mater.* Vol. 6. No. 1 (dic. de 2019), pág. 015024.
- [65] V. Torres et al. «Valley notch filter in a graphene strain superlattice: Green's function and machine learning approach». En: *Phys. Rev. B* Vol. 100 ( No. 20 nov. de 2019), pág. 205411.
- [66] Jing Wang, Zijing Lin y Kwok Sum Chan. «Pure valley current generation in graphene with a Dirac gap by quantum pumping». En: *Appl. Phys. Express* Vol. 7. No. 12 (nov. de 2014), pág. 125102.
- [67] Weiran Wang et al. «Biosensing and biomedical applications of graphene: A review of current progress and future prospect». En: *Journal of The Electrochemical Society* Vol. 166. No. 6 (2019), B505.
- [68] Yuehang Xu et al. «Radio frequency electrical transduction of graphene mechanical resonators». En: *Applied Physics Letters* Vol. 97. No. 24 (dic. de 2010), pág. 243111.

- [69] Arend M. van der Zande et al. «Large-Scale Arrays of Single-Layer Graphene Resonators». En: *Nano Letters* Vol. 10. No. 12 (dic. de 2010), págs. 4869-4873.
- [70] Dawei Zhai y Nancy Sandler. «Local versus extended deformed graphene geometries for valley filtering». En: *Physical Review B* Vol. 98. No. 16 (oct. de 2018), pág. 165437.
- [71] Xianghui Zhang et al. «Vibrational modes of ultrathin carbon nanomembrane mechanical resonators». En: *Applied Physics Letters* Vol. 106. No. 6 (2015), pág. 063107.



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL  
ESTADO DE MORELOS



Cuernavaca, Mor., a 8 de Noviembre de 2023

**DRA. LINA ANDREA RIVILLAS ACEVEDO**  
**COORDINADORA DEL POSGRADO EN CIENCIAS**  
**PRESENTE**

Atendiendo a la solicitud para emitir DICTAMEN sobre la revisión de la TESIS titulada: **Nano resonadores de grafeno para valletónica**, que presenta el alumno **Walter Sigfrido Ortiz Guerrero (10024358)** para obtener el título de **Doctor en Ciencias**.

Director de tesis: Dr. Thomas Werner Stegmann  
Unidad Académica: Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas (IICBA)

Nos permitimos informarle que nuestro voto es:

NOMBRE	DICTAMEN	FIRMA
Dr. Rolando Perez Álvarez CInC – UAEM	APROBADO	
Dr. Raúl Salgado García CInC – UAEM	APROBADO	
Dr. Outmane Oubram FCQ e I – UAEM	APROBADO	
Dra. Vivechana Agarwal CIICAp – UAEM	APROBADO	
Dr. José Eduardo Barrios Vargas ICF – UNAM	APROBADO	
Dr. Thomas Werner Stegmann ICF – UNAM	APROBADO	
Dr. Antonio Gamboa Suárez CIQ – UAEM	APROBADO	







UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL  
ESTADO DE MORELOS

Se expide el presente documento firmado electrónicamente de conformidad con el ACUERDO GENERAL PARA LA CONTINUIDAD DEL FUNCIONAMIENTO DE LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS DURANTE LA EMERGENCIA SANITARIA PROVOCADA POR EL VIRUS SARS-COV2 (COVID-19) emitido el 27 de abril del 2020.

El presente documento cuenta con la firma electrónica UAEM del funcionario universitario competente, amparada por un certificado vigente a la fecha de su elaboración y es válido de conformidad con los LINEAMIENTOS EN MATERIA DE FIRMA ELECTRÓNICA PARA LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE ESTADO DE MORELOS emitidos el 13 de noviembre del 2019 mediante circular No. 32.

### Sello electrónico

**THOMAS WERNER STEGMANN** | Fecha:2023-11-13 12:09:56 | Firmante

Mzg9o7OKtBRNiuNVMBpj6TdnLgLoQl3qjdQN+LM+kH2jtbrb6HCMWODHgSSz5UrJ62Ssob8t/98YesYqdi7MiZrWmchwZ3sEL0eGZ13uJekc0CnG11ph4NaPdSweCu4NKNtrpB03sJHZQ2gt5TqUJAqW9X4hcwQtqnqkXyv5wCpL7i0RPilurzgQXvmQuev1rdySgRi8PvVYgGdGWRRowH6G6Rj9nQWaa6hFh5iSC1H3cLwTtu960JFGAFP5rZ5/ebU5vB5bZ2aVLNVw03/LrSn0qrtS+5w+RsnMnX4DSVs4IKBPAi/PsnPRtOOLVLq7CCsIMEtUGZGF2UF9/TiQ==

**ROLANDO PEREZ ALVAREZ** | Fecha:2023-11-13 12:18:32 | Firmante

Hm6uP477K1Pxpj7F6706PuecRuMt9NbQqgftkNDnR1c/vc6YxyUS2HBO+jlgG2w4dpACKY3/3L2qalpznrPkqguk/iolfWT/WgQbNEioypWX7ttgUirmHjChv1WdLb794r/ghtEjaykf2R3W5aqF14GTLb7hhpFgTAXoy2VSGLeiUqdkSYxPCwS+rOkaBSZ/rjRvuYMTcU5elplcINH3qUQg3obbRdd/a4nRspMFqJNRSmkjN17sU58IQNHheXSDfETeD875HfWR+P6qDLE751LZAKFG+kc/c6m7Q1N7bYZNuKBFXUH9co7Pd8XHLclXxL9Sj6MPvxQXl6vpW8B/w==

**JOSÉ EDUARDO BARRIOS VARGAS** | Fecha:2023-11-13 12:34:00 | Firmante

wK4ybR6H2WlyJsy7+hvxTXigHM3wSL2Sg5SNsDKJ9OmyiVpTHjh+U4qJ1Jadq8IGXpxOgRWSirwx+Lr3e3K4Qx8SrlfUEm7odFIUPT+4X50EY6nCirSCwFczVDJxnUdnIK7siJcfQGE7cwRsiBKGTtd8ssvTX+OtwssuduqtivByWTBXRhe/2FPWsn3L04A7VJBMixmME609CZNFbVOyZaC73JERofCQsHxsosHhAr7AeSR8o/ZhIzeEP+uyYHpgUcEvEjVOZ9QLI2WSwCB0iDWmgrp0ZEx+zlsfAqyJw3aGsLhpC4Pn9A3YFIM4bEG4xjUESnw8HK5Ha69zFAG6Lw==

**ANTONIO GAMBOA SUAREZ** | Fecha:2023-11-13 12:50:38 | Firmante

cGEb4ouyQBFs1UY75Ba+MQ3ZkqpUPTLuNuA4t09SNFE+IChfKgejW4U2iOGcby+vVxXj6ZQtYo/HN0a+fMmEytOQQAo1Q0mo/4nYJIGg8rzMOay8hFQ4yJfVdK34n+EegZv/eRqivA6rsSxOzXlLGP521JFPindlad9CdbunRDDVB7e8sokoy3WWCsGRp583PdKlrvO1h9CivAzSpBG/N4V4J8h2Cvfc2fAzAl/aV6RcxhUJ1ckfG25tKjJp/bTiwyp3Y39t1NOsunC1pqcnoHrFPuY/OL7YzHgFgWWR5QmyRZemXmjQ50Ujuhel/pLAcUdiAoiE6sTG2Ntgz/Q==

**OUTMANE OUBRAM** | Fecha:2023-11-13 17:04:18 | Firmante

MYGBRqZN6swNIIJCQ/rZPxTirtWqkisoOpHecPhlZ5Dvuh3KdVYhHlck4cPBKyKwhEEFpDH8WNOe0fAUcXKEx/6unihfop9F3jVWxAcpgjOY/D4IV6A3GnwrP0gJimPuuGubHgHq9v6q9P9Ij+mVA2CM4jWyefq0tluEkamE/Kcc0xK6g9KsU90Vz3xLcTVSwdj5bupSEnjOt62sY6cXepwljK2A2TioSONNjYyihyo4R/z28o7BjBROdbpI3rImyPHaE47DmKWEd2xs58PN3nx5iGaDoPjkhiSuQwd54GXCY6RnID1ESXMHAR4PeLeV7z2URJlIbN8FCNmyA==

**RAUL SALGADO GARCIA** | Fecha:2023-11-13 19:39:56 | Firmante

SsF44OQ0+r9eiJvn5Fn/0iXRoldCeUgOkUWNNk06QkbUG/CPAoC0bpxtHwB5Map3DaJulFTt299oZNVtOCoCZebNh2mEt6JgyUrPfnGXA4KUi1Wv8+DzGGImNwr7XJdUXfK33vN43G2ELGeP48v1HL8Q9SrpqFfSRWUDhiq7tVX0B7ShU0fPUHki8Yyic2f29zFVEabpZZdYS+y+TkwiKdp04bEl+qY5t7Broq2aM91/Ug9Kvn8e3FNBoKYJlfj2w+UyqY6QaMcdTmHsWaHQOrLUsiGovqTvxqx0PzSty44O6ntJ28Puc7u8x8iPhXDO+zfw6a4i4iMJSaQ==

**VIVECHANA AGARWAL** | Fecha:2023-11-13 21:04:48 | Firmante

TU+vQ/zltdEiR195gqexsBLresvUAQPmcsWY4MysZ07NXsftua5VrY+YPScgGCa1PQdV0wICEuP4YrjSWdhCx85oR8b0kstjNLDmqa9HGJY6pN9nUZA0L0y9plUwPw4rEbyXQ1Zj6ZDPgjsQUtWj79cz8nxIMZ7pyzHfxlo+g4B7MsSldBB1FTOYIAGm7Jfxp5SshWIInHuoJO7UYm1+mgMx4wXwVGe1T7rlp3wJhZbVfkb49E5tYt0kAeFgL/0xl2TqlyLwnKG8qcoZ6ELGbpCaCzxf39IB/bXiHmV+dWDX3oh2oU0fWbou2EtesWirM2r+XsFL053FzG0DtBg==

Puede verificar la autenticidad del documento en la siguiente dirección electrónica o escaneando el código QR ingresando la siguiente clave:



5ZtUbfDXN

<https://efirma.uaem.mx/noRepudio/GRMr90unamYZLdSP4lle9ZjVqrqeEwYt>

