

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS

PROPIEDADES DE TRANSPORTE EN GRAFENO

**TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE:
DOCTOR EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS**

PRESENTA:
MOHAMMED MINIYA

DIRECTOR: Dr. Luis Manuel Gaggero Sager
CO-DIRECTOR: Dr. Outmane Oubram

CUERNAVACA, MORELOS

Febrero, 2024

A mi familia

Agradecimientos

En primer lugar, expreso mi profundo agradecimiento a mi familia, quienes siempre estuvieron a mi lado brindándome su apoyo durante estos cuatro años. No puedo subestimar la importancia de su respaldo en este viaje.

Quiero extender mi más sincero agradecimiento a mis dos asesores, el Dr. Luis Manuel Gaggero Sager y el Dr. Outmane Oubram, sin cuya orientación y colaboración este trabajo y las publicaciones asociadas habrían sido inalcanzables. Su apoyo académico y valiosos consejos han sido fundamentales en mi desarrollo como investigador y como persona.

Asimismo, agradezco a mi comité tutorial, compuesto por la Dra. Lorena Díaz González, el Dr. Volodymyr Grimalsky y el Dr. Diego Seuret Jiménez. Sus comentarios, sugerencias y críticas han contribuido de manera significativa a la mejora de esta tesis.

Un reconocimiento especial al comité evaluador, integrado por los distinguidos profesores-investigadores: Dra. Lorena Díaz González, Dr. Volodymyr Grimalsky, Dr. Diego Seuret Jiménez, Dr. Rolando Pérez Álvarez, Dr. Isaac Rodríguez Vargas, Dr. Luis Manuel Gaggero Sager y Dr. Outmane Oubram. Sus observaciones, impresiones, preguntas y sugerencias han enriquecido considerablemente mi trabajo. No puedo pasar por alto expresar mi gratitud al Posgrado en Ciicap de la UAEM por brindarme la oportunidad de formar parte de su historia.

Finalmente, mi más sincero reconocimiento y agradecimiento a la CONAHCYT y MÉXICO por la beca que hizo posible la realización de este doctorado.

Publicaciones

[1] M. Miniya, O. Oubram, A. G. Reynaud-Morales, I. Rodriguez-Vargas and L. M. Gaggero-Sager, Thermoelectric effects in self-similar multi-barrier structure based on monolayer graphene, *Fractals* 30 2250068 (2022).

[2] M. Miniya, O. Oubram, A. G. El Hachimi, L. M. Gaggero-Sager, Fano factor in self-similar multi-barrier structure based on graphene monolayer, *J. Appl. Phys.* 131 024303 (2022).

[3] M Miniya, D S Díaz-Guerrero, L M Gaggero-Sager, O Oubram, Scaling transformations among electron transmission curves for golden self-affine multibarrier structures based on graphene, *Phys. E* 144 115420 (2022).

[4] M Miniya, O Oubram, AG El Hachimi, LM Gaggero-Sager, Spatial quasi-bound states of Dirac electrons in graphene Monolayer, (Enviado Scientific reports).

[5] M Miniya, O Oubram, LM Gaggero-Sager, Quantum transport in novel self-similar structure based on graphene, (Enviado Physica Scripta).

[6] M Miniya, L M Gaggero Sager, M E Mora-Ramos, R Pérez-Álvarez, O Oubram, Self-similarity of quantum transport in graphene heterostructures, (Enviado Revista Mexicana de Física).

Resumen

En esta tesis se ha investigado las propiedades de transport y termoelectricidad de un sistema auto-similar multi-barrera basado en monocapa de grafeno. Este sistema se construyó escalando la altura de la barrera mediante la proporción áurea y con varias generaciones. Investigamos las propiedades de auto-similaridad en los espectros y entre generaciones del coeficiente de transmisión, factor de Fano, conductancia, coeficiente de Seebeck y factor de potencia. Se calcula el coeficiente de transmisión resolviendo la ecuación de Dirac del grafeno y usando el método de la matriz de transferencia.

Encontramos propiedades de la auto-similaridad en los espectros del coeficiente de transmisión, las curvas de diferentes generaciones de este último se conectan por lo que llamamos reglas de escalamiento. Estas reglas están en función del número de generación, la altura de las barreras principales y la longitud total del sistema, se establecen como expresiones analíticas generales. Las reglas de escalamiento representa una evidencia de auto-similaridad.

Luego, se ha investigado el factor de Fano en dos tipos de estructuras de potencial auto-similar en una monocapa de grafeno. Estas estructuras están construidas por el potencial basado en el sustrato y el potencial electrostático. Encontramos que la estructura potencial auto-similar basada en el sustrato manifiesta un comportamiento auto-similar en el factor de Fano y la conductancia. Por lo tanto, propusimos reglas de escalamiento que representan una invariancia de escala entre las generaciones, las alturas de las barreras principales y las longitudes totales de las estructuras. En particular, reportamos el valor máximo del factor de Fano para los potenciales electrostáticos auto-similares. Además, se analizan en términos de generación, alturas de barrera principal y longitudes totales de las estructuras.

En este trabajo, exploramos también las propiedades auto-similares en los efectos termoeléctricos usando misma estructura mencionada anteriormente. Se ha utilizado el formalismo de Landauer-Büttiker y la fórmula de Cutler-Mott para calcular la conductancia, el coeficiente Seebeck y el factor de potencia. Encontramos el comportamiento auto-similar y formulamos las reglas de escalamiento.

El uso de la proporción áurea como factor de escalamiento de las alturas de barreras proporciona nuevas reglas de escalamiento, de hecho es uno de los factores únicos que da reglas de escalamiento. Además, cambiando los parámetros de geometría de la barrera o la estructura, afecta el comportamiento auto-similar.

Finalmente, a partir el coeficiente de transmisión y usando formalismo de matriz de transferencia, se realizó un estudio de estados cuasi-localizados (en sus siglas inglés (QBSs)), en monocapa de grafeno inducido por barrera simple y doble barrera. Encontramos que las QBSs se localizan dentro de la región de barrera, a energías superiores a la barrera simple. Además, observamos QBSs en la barrera doble y su posición depende de la distancia y anchura del pozo entre las dos barreras. La anchura y la altura de la barrera influyen significativamente en los QBS, mientras que la anchura del pozo influye en los niveles de energía de resonancia de los QBS en la barrera doble. Curiosamente, los QBS pueden manipularse en el sistema de grafeno.

Abstract

In this thesis, the transmission properties of a new design of self-similar multibarrier system based on graphene monolayer have been investigated. In order to build this system, the barrier height was scaled across numerous generations while using the golden ratio. We investigate the self-similarity properties in the spectra and between generations of the transmission coefficient, Fano factor, conductance, Seebeck coefficient, and power factor. The transmission coefficient is calculated by solving the Dirac equation of graphene and using the transfer matrix method. We find properties of self-similarity in the transmission coefficient spectra; the curves of different generations of the latter are connected by what we call scaling rules. These new rules are a function of the generation number, the main barrier height, and the system length and are established as general analytical expressions by the way the scaling rules represent evidence of self-similarity.

We have also studied the Fano factor in two different types of self-similar potential structures in a graphene monolayer: electrostatic potentials and substrate-based potentials. We find that the Fano factor exhibits self-similar behavior in the second system. Scaling rules are formulated in order to demonstrate the scale invariance between generations, different barrier heights, and different structure lengths. We also report the maximum value of the Fano factor for electrostatic-based self-similar potentials and examine it in terms of generation, primary barrier heights, and overall structure lengths.

In this work, we also explore the self-similar properties of thermoelectric effects using the same structure mentioned above. The Landauer-Büttiker formalism and the Cutler-Mott formula have been used to calculate the conductance, Seebeck coefficient, and power factor. We found the self-similar behavior in the Seebeck coefficient, power factor, and scaling rules formulated as mathematical expressions that connect generations of the structure.

Using the golden ratio as a scaling factor for the barrier heights provides new scaling rules; in fact, it is one of the unique factors that provides scaling rules. In addition, changing the geometry parameters of the barrier or structure affects the self-similar behavior.

Finally, from the transmission coefficient and using transfer matrix formalism, a study of spatial quasi-localized states (QBSs) in barrier-induced graphene monolayer was performed. We find that QBSs localize within the barrier region at energies higher than the single barrier. In addition, we observe QBSs in the double barrier and their position depends on the distance and width of the well between the two barriers. The width and

height of the barrier significantly influence the QBSs, while the width of the well influences the resonance energy levels of the QBSs in the double barrier. Interestingly, the QBSs can be manipulated in the graphene system, which offers the potential for optoelectronics devices.

Índice general

Agradecimientos	II
Publicaciones	III
Resumen	IV
Abstract	VI
Índice general	VII
1. Introducción	1
1.1. Generalidades	1
1.2. Propiedades de transporte y termo-electricidad en grafeno	4
1.2.1. Propiedades de transporte en grafeno	4
1.2.1.1. Estructura de grafeno	4
1.2.1.2. Efecto de Klein	6
1.2.1.3. Régimen balístico, cuasi-balístico	7
1.2.1.4. Modelo de Landauer	8
1.2.2. Termoelectricidad	9
1.3. Autosimilaridad	10
1.4. Objetivo	12
2. Metodología	13
2.1. Matriz de transferencia	13
2.1.1. Coeficiente de transmisión	16
2.1.2. Conductividad	17
2.1.3. Termoelectricidad	17
2.1.4. Estados casi-localizados	17
3. Resultados	22
3.1. Propiedades de auto-similaridad en el coeficiente de transmisión	22
3.2. Propiedades de auto-similaridad en el Factor de Fano	27
3.3. Propiedades de auto-similaridad en Termoelectricidad	34
3.4. Estados casi-localizados en grafeno	43

Capítulo 1

Introducción

1.1. Generalidades

El grafeno es un material prometedor en nanoelectrónica [1], debido a sus propiedades exóticas y su utilidad para comprender la física de los materiales [2]. El grafeno está compuesto de átomos de carbono en una estructura de panal [3]. Durante la última década, los investigadores han empezado a interesarse en nuevas estructuras para controlar el transporte de electrones [4]. En concreto, los electrones de Dirac pueden controlarse mediante los campos eléctricos y magnéticos externos y/o sustratos [5] de forma periódica o aperiódica [6–8]. Estos efectos externos modulan la estructura de la banda y consecuentemente cambian las propiedades físicas de los materiales [9]. En principio, hay varias estructuras, por ejemplo, estructuras dispuestas siguiendo secuencias aperiódicas (Fibonacci, Thue-Morse, etc.) o estructuras auto-similares. Estos sistemas han llamado un gran interés [10–12], debido a sus exóticas y únicas propiedades electrónicas y optoelectrónicas [13]. Los sistemas multi-barreras en grafeno, creados mediante los diferentes mecanismos indicados anteriormente, son cruciales para modular las propiedades de transporte y probablemente los efectos termoeléctricos.

Recientemente, se ha reportado de la modulación nanométrica fractal [14]. De acuerdo con la definición matemática, los fractales son objetos geométricos homogéneos y auto-similares, que pueden usarse para describir muchos fenómenos físicos [15]. Los fractales existen en la naturaleza [16], en ciertas plantas como el brócoli romanesco, también en las costas, la distribución de especies, el crecimiento de árboles, los ríos y pulmones. Muchos fractales tienen la propiedad de auto-similar, al menos aproximadamente, si no exactamente [17]. Un objeto auto-similar es un objeto cuyos componentes se asemejan a la forma

completa. Esta reiteración de detalles o patrones ocurre a escalas progresivamente más pequeñas, de modo que cada parte de una parte, cuando se agranda, básicamente parece una parte principal del objeto completo. De hecho, un objeto auto-similar permanece invariable bajo cambios de escala, es decir, tiene una simetría de escala, por lo que hay un factor de escala que conecta las partes similares.

Desde una perspectiva de ingeniería, los fractales representan una estrategia importante para la integración de materiales duros y blandos [18, 19], que permite la adaptación a la mayor deformación elástica de la electrónica expansible. Recientemente, se ha reportado un nuevo metamaterial fractal basado en grafeno [20]. Este nuevo metamaterial fractal representa una vía propicia para la realización de una plataforma compacta y de banda ancha para el futuro de los dispositivos optoelectrónicos. Además, se han realizado varios estudios [12, 21–23] destacando el transporte en sistemas auto-similares multi-barreras en grafeno. Estos estudios reportan un comportamiento auto-similar en el coeficiente de transmisión y la conductancia, así como expresiones matemáticas como reglas de escala [24]. Se han reportado propiedades de transporte con barreras magnéticas en un sistema autosimilar en monocapa de grafeno [23]. Se ha encontrado que existen separaciones entre mini-banda de energía y oscilaciones regulares en las curvas de conductancia.

En los últimos años, las propiedades termoeléctricas han atraído la atención de investigadores e ingenieros [25]. La termoelectricidad es un fenómeno físico que consiste en la conversión directa de energía térmica en electricidad [26]. Las últimas investigaciones sobre el efecto termoeléctrico han demostrado que podría ser una solución para reducir la cantidad de calor que desperdicia la sociedad actual. Según varios estudios, el calor ambientalmente desperdiciado representa más de 50 % de la energía producida [27]. Se han realizado numerosos estudios teóricos sobre el efecto termoeléctrico en varios sistemas basados en materiales de 2D, mostrando una mejora en la termoelectricidad [28, 29].

Se han reportado muchos estudios teóricos sobre estructuras basadas en materiales de baja dimensión, con el objetivo de obtener valores más altos para la Figura de mérito (ZT) [30, 31]. Sin embargo, en pequeñas dimensiones se produce el confinamiento cuántico en este tipo de materiales, lo que conduce a la redistribución de la densidad de estados, lo que ofrece la posibilidad de variar el factor de potencia y la conductividad térmica de forma independiente y finalmente mejorar el valor ZT . En otras palabras, para incrementar el coeficiente de Seebeck, es plausible que cualquier efecto que mejore la dependencia energética de la conductividad pueda ser útil. Por ejemplo, aumentando la dependencia energética de la densidad de carga, que directamente depende de la densidad de los

estados. En principio, los sistemas de 2D proporcionan mucha más conductividad que debería reflejarse en el coeficiente de Seebeck [32].

Las mediciones de ruido de disparo (Shot noise) han demostrado ser una valiosa herramienta de diagnóstico en nanotubos de carbono, se puede definir cómo a bajas temperaturas, la corriente eléctrica a través de la nanoestructura exhibe fluctuaciones dependientes del tiempo debido a la discreción de la carga eléctrica[33, 34] y se puede evaluar mediante el factor Fano definido como la relación entre la potencia de ruido y la corriente media[35, 36]. Se espera un valor máximo universal de $1/3$ para el factor Fano, que disminuye con el aumento de la densidad del portador de carga, para grandes anchos y largos W/L en grafeno [37]. Por otro lado, el mínimo de la conductividad está asociado con un máximo del factor Fano [38]. Se estudiaron la conductancia y el ruido de disparo en la capa de grafeno [39], se ha demostrado que aparece un nuevo punto de Dirac en el que la conductancia es mínima y el factor Fano alcanza su valor máximo que igual $1/3$. Las investigaciones teóricas y experimentales del grafeno en superredes tales como periódicas y aperiódicas, por ejemplo: Fibonacci, Morse (TM) y estructuras auto-similares están atrayendo más atención por su capacidad para controlar el transporte electrónico [40–43]. Algunos de los trabajos han reportado cambios en los parámetros de estructura y la generación de la secuencia Morse, que tiene un gran efecto sobre la conductancia y el factor Fano, así como el factor Fano, tiene un máximo cercano a $1/3$ en la vecindad del punto de Dirac [44].

En esta tesis, hemos estudiado el transporte y los efectos termoelectricos en diferentes estructuras auto-similar, basada en el grafeno. En este sistema, la altura de la barrera se escala por la proporción áurea. De hecho, la razón áurea se encuentra entre los pocos números que dan la regla de escala. Este tipo de estudio no se ha realizado antes, ya que informa los patrones auto-similares en el coeficiente de Seebeck y en el factor de potencia.

1.2. Propiedades de transporte y termo-electricidad en grafeno

1.2.1. Propiedades de transporte en grafeno

1.2.1.1. Estructura de grafeno

El grafeno es un cristal bidimensional compuesto por átomos de carbono en un panel de abeja relacionados entre sí por enlaces covalentes σ . La celda unitaria contiene dos átomos, A y B ubicados a la distancia $a_{C-C} = 1.42 \text{ \AA}$. Consiste en dos subredes triangulares idénticas desplazadas entre sí por la distancia a (ver Fig.1.1). En el espacio directo, los vectores de red están definidos por:

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

Los vectores en espacio recíproco son:

$$\vec{a}_1^* = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}); \quad \vec{a}_2^* = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}) \quad (1.2)$$

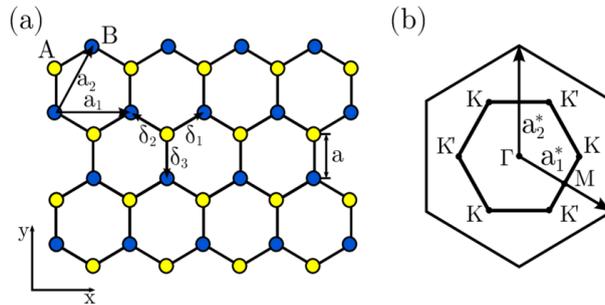


FIGURA 1.1: (a) Superred en espacio directo, a_1, a_2 representan los vectores que definen la red de Bravais. (b) Espacio recíproco, a_1^*, a_2^* son los vectores de la primera zona de Brouillin.

Estos vectores definen la primera zona hexagonal de Brillouin. Los puntos de simetría son Γ , situado en el centro, K y K' , situados en los vértices de la zona de Brillouin. K y K' son de gran importancia para describir la estructura de bandas del grafeno, sus coordenadas en el espacio recíproco son:

$$K = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}}a\right); \quad K' = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}}a\right) \quad (1.3)$$

Un átomo de carbono tiene la configuración $1s^2 2s^2 2p^2$ y posee cuatro electrones de valencia para formar enlaces químicos. En grafeno, tres electrones de valencia se hibridan en tres orbitales sp^2 y forman enlaces σ en el plano, mientras que el electrón restante de cada átomo de carbono forma orbitales π^- (o P_z^-) perpendiculares al grafeno plano. El enlace σ es el enlace químico covalente más fuerte, esto explica las excelentes propiedades mecánicas del grafeno. Los orbitales π determinan la estructura electrónica de baja energía del grafeno y son responsables de su alta conductividad eléctrica. La estructura electrónica del grafeno se puede calcular utilizando un modelo de unión fuerte, como lo demostró por primera vez P. R. Wallace [45]. El modelo de unión estrecha solo tiene en cuenta la interacción entre los átomos de carbono vecinos más cercanos (A-B) con energía de salto γ_0 . La relación de dispersión de energía obtenida de los cálculos del modelo de unión estrecha da:

$$E(\vec{k}) = \pm \gamma_0 \sqrt{1 + 4\cos^2\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) + 4\cos\left(\frac{3k_x a}{2}\right)\cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right)} \quad (1.4)$$

donde $\gamma_0 = 3.12 - 3.15$ eV es la energía de salto del vecino más cercano [1], k_x y k_y son los componentes de momento \vec{k} en x y y direcciones en el plano.

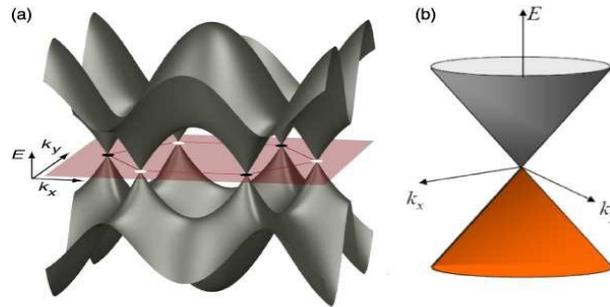


FIGURA 1.2: (a) Estructura electrónica del grafeno. (b) La banda de valencia (banda naranja inferior) y la banda de conducción (banda gris superior) se conectan en los puntos K de la zona de Brouillin. En la vecindad de estos puntos, la relación de dispersión de energía es lineal.

La figura 1.2 muestra la estructura electrónica del grafeno obtenida a partir de la Ec. 1.4, donde las bandas de conducción y valencia están conectadas en los seis puntos K y K' no equivalentes de la primera zona de Brouillin. Para el grafeno sin dopar, la energía de Fermi se encuentra exactamente en los puntos de Dirac. Cerca de los puntos K y K' , donde $\vec{k} = \vec{K} + \delta\vec{k}$, la estructura de la banda de grafeno se puede describir mediante

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \pm \hbar v_f |\delta\vec{k}| \quad (1.5)$$

donde v_F es la velocidad de Fermi:

$$v_F = \frac{\sqrt{3}\gamma_0 a}{2\hbar} \quad (1.6)$$

La ecuación de arriba muestra que la estructura electrónica del grafeno exhibe una dispersión lineal en función del vector de onda en los puntos de Dirac. Como resultado, los portadores de carga libres en el grafeno se comportan exactamente como fermiones de Dirac relativistas sin masa (cuasi-partículas) con velocidad v_F . En consecuencia, los electrones (agujeros) en el grafeno cerca de los puntos K (K') pueden describirse mediante la ecuación de Dirac.

1.2.1.2. Efecto de Klein

La dispersión unidimensional es uno de los problemas canónicos de la mecánica cuántica. Para partículas masivas no relativistas, la dispersión de un paso de potencial finito ayuda a elucidar conceptos fundamentales de la mecánica cuántica, como el efecto túnel. Poco más de un año después del descubrimiento por parte de Dirac de la ecuación para electrones relativistas [46]. Oskar Klein calculará el problema de transmisión de barrera para electrones relativistas [47]. El resultado de Klein se consideró paradójico en ese momento. En mecánica cuántica no relativista, la probabilidad de transmisión de una partícula con energía E que incide sobre una barrera de potencial con altura $V > E$ a lo largo de la dirección x decae exponencialmente con la distancia, $T^2 \sim e^{-kx}$ donde $k > 0$ es un factor cinético que depende de la energía de la partícula incidente.

En contraste, Klein encontró que para el caso relativista, la probabilidad de transmisión no decae con la distancia, incluso para $V \gg E$, $|T|^2 \sim (\frac{4\alpha}{(1+\alpha)^2})^2$ (aquí $\alpha \geq 1$) es un factor cinemático obtenido de la ecuación de Dirac). La llamada paradoja de Klein tiene dos partes. Primero, mucho más allá de la barrera, los estados de dispersión son antipartículas, en el contexto de la materia condensada, agujeros, una consecuencia teórica de la ecuación de Dirac no confirmada experimentalmente en el momento del cálculo de Klein [48]. Las partículas incidentes no hacen túneles en el sentido de propagarse una distancia corta como ondas evanescentes; más bien, se propagan como antipartículas cuya relación de dispersión energía-momento invertida les permite moverse libremente por debajo de la barrera. La segunda es que, incluso dada la existencia de agujeros, la excitación en la barrera debería ir acompañada de una caída exponencial de la probabilidad de transmisión debido al fuerte potencial de repulsión en el escalón.

El caso del grafeno fue realizado por Katsnelson et al. [49], un enfoque diferente teniendo en cuenta la naturaleza quirral de los portadores ya se discutió hace una década en el contexto de la conducción eléctrica. En el grafeno monocapa, los estados de partículas libres son quirales, lo que significa que su pseudo-spin es paralelo (antiparalelo) a su impulso para electrones (agujeros). Esto provoca una supresión de la retrodispersión en ausencia de pseudo-spin, lo que conduce a conductancias más altas de metal sobre semiconductores nanotubos de carbono [50]. Para comprender la interacción entre este efecto y el túnel de Klein en grafeno, introducimos los potenciales externos, el Hamiltoniano de Dirac. En el caso de una barrera unidimensional (1D), el momentum componente paralela a la barrera, p_y , se conserva. Como resultado, los electrones normalmente inciden en una unión $p - n$ de grafeno, tiene prohibido dispersarse oblicuamente por la simetría del potencial, mientras que la quiralidad les prohíbe dispersarse directamente hacia atrás: el resultado es una transmisión perfecta como agujeros [49], y esto es lo que se entiende por túnel de Klein en el grafeno.

1.2.1.3. Régimen balístico, cuasi-balístico

Aquí revisamos los diferentes regímenes de transporte que pueden observarse en sistemas mesoscópicos, es decir, en sistemas donde una o más dimensiones son menores que las longitudes de transporte características l_e y l_ϕ . Los conductores macroscópicos obedecen la ley de Ohm: la conductancia G de un sistema está directamente relacionada con las dimensiones de dicho sistema. En el caso de un sistema bidimensional de anchura W y longitud L , la conductancia se escribe:

$$G = \sigma WL \tag{1.7}$$

donde $\sigma = ne\mu$ es la conductividad, siendo n la densidad de portadores del sistema y μ la movilidad, valor directamente proporcional al tiempo medio entre dos colisiones. σ es una propiedad intrínseca del material, independiente de sus dimensiones. Para los conductores mesoscópicos, la ley de Ohm puede resultar inoperante si la distancia entre dos colisiones es mayor que la distancia entre los contactos de medida. Se dice entonces que el sistema es balístico. Según la ley de Ohm, la conductancia de estos sistemas debería tender hacia el infinito, pero experimentalmente la conductancia tiende hacia valores finitos.

Hay que distinguir entre dos tipos de colisión, en función del mecanismo de dispersión considerado: las colisiones elásticas y las inelásticas. Una colisión elástica solo afectará a la dirección del impulso del electrón y dejará inalterada su energía. Una colisión inelástica

afectará también a la fase del electrón y a la norma del impulso. Por tanto, podemos definir dos tiempos medios asociados a las colisiones: El tiempo de relajación del impulso τ_e , que representa el tiempo medio durante el cual un electrón conservará su impulso, es decir, el tiempo durante el cual se mantiene el estado de un electrón. A veces son necesarios varios choques (elásticos o inelásticos) para destruir el impulso. Definimos una longitud característica, el camino libre medio $l_e = v_F \tau_e$ donde v_F es la velocidad de Fermi.

El tiempo de relajación de fase τ_ϕ representa el tiempo durante el cual un electrón conservará su fase. Si $\tau_\phi < \tau_e$ consideramos que los electrones conservan su momento más tiempo que su fase y la velocidad característica es la velocidad de Fermi; entonces $l_\phi = v_F \tau_\phi$. Si este no es el caso, el transporte será difusivo en una región donde la fase permanece coherente, por lo que el coeficiente de difusión de Einstein $D = v_F^2 \tau_e / 2$ para determinar la distancia media recorrida mientras la fase se conserva; entonces $l_\phi^2 = D \tau_\phi$.

1.2.1.4. Modelo de Landauer

Esta sección está adaptada de libro de S. Datta [51], donde vamos a definir la fórmula de Landauer, llamada así por Rolf Landauer 1957 [52], es una fórmula que relaciona la resistencia eléctrica de un conductor cuántico con las propiedades de dispersión de conductores, esa fórmula es realmente útil para calcular la corriente en dispositivos a nanoescala definida por:

$$I = \frac{2q}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T(E) [f(E - \mu_1) - f(E - \mu_2)] dE, \quad (1.8)$$

donde $T(E)$ es el coeficiente de transmisión, $f(E)$ es la función de distribución de Fermi-Dirac, μ_1 y μ_2 son las energías de Fermi en el contacto de derecha y izquierda del conductor. Aplicando un voltaje $\delta\mu$ a la función de Fermi:

$$f(E - \mu_1) - f(E - \mu_1 + \delta\mu), \quad (1.9)$$

y usando el primer orden de expansión de Taylor:

$$f(E - \mu_1) - f(E - \mu_1 + \delta\mu) = -\delta\mu \frac{\partial f(E - \mu_1)}{\partial E}. \quad (1.10)$$

La ecuación de corriente se puede escribir como:

$$\delta I = \frac{2q}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} -T(E) \delta\mu \frac{\partial f(E - \mu_1)}{\partial E} dE, \quad (1.11)$$

la conductancia por una fuente de potencial G es dado por:

$$G(\mu_1) = \frac{\delta I}{\delta \mu/q} = \frac{2q^2}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} -T(E) \frac{\partial f(E - \mu_1)}{\partial E} dE = \frac{2q^2}{h} T_0, \quad (1.12)$$

donde $T_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} T(E) F_T(\mu_1) dE$, $F_T = -\frac{\partial f(E - \mu_1)}{\partial E} = \frac{1}{4k_B T} \operatorname{sech}^2\left(\frac{E}{2k_B T}\right)$.

Consideramos que el caso, donde la temperatura es 0 k, F_T se convierte a una ecuación estándar de Dirac con área igual a uno. En la ecuación (μ_1 se cambia por E en la expresión) llamada la fórmula de Landauer:

$$G(E) = \frac{2q^2}{h} T(E) \quad (1.13)$$

1.2.2. Termoelectricidad

Los primeros indicios de efectos termoeléctricos están relacionados con los trabajos de Alessandro Volta en 1794, cuando observó la aparición de una fuerza al aplicar una diferencia de temperatura a la pata de una rana. Sin embargo, el fenómeno termoeléctrico se descubrió por primera vez a principios del siglo XIX. por Thomas J. Seebeck. Durante un experimento, observó que un circuito formado por dos metales distintos con uniones a temperaturas diferentes desviaba el imán de una brújula. Correlacionó este fenómeno con la aparición de un campo magnético, lo que le llevó a proponer una teoría sobre el origen del magnetismo terrestre. Oersted luego relacionó este efecto con la aparición de una diferencia de potencial cuando se aplica un gradiente de temperatura. Así, el efecto Seebeck relacionó dos potenciales termodinámicos que son la temperatura y el potencial electroquímico [28, 53]. El efecto de cuantificación del tamaño puede entenderse como sigue. Para un conductor dado, se puede asociar una conductividad $\sigma(E)$ dependiente de la energía con los electrones de densidad $n(E)$ que llenan los estados de energía entre E y $E + dE$. Se escribe como

$$\sigma(E) = e n(E) \mu(E), \quad (1.14)$$

donde e es la carga libre del electrón y $\mu(E)$ es la movilidad. Para un conductor de longitud L y sección S , la conductividad total puede deducirse como [54]

$$\sigma = G \frac{L}{S} = \int \sigma(E) \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E}\right) dE, \quad (1.15)$$

donde $f(E)$ es la función de distribución de Fermi. Debe tenerse en cuenta que para conductores muy pequeños, puede ser más relevante considerar la conductancia G que puede formularse en la forma de ecuación de Landauer en términos de la transmisión dependiente de la energía $T(E)$ como

$$G = \frac{2e^2}{h} \int T(E) \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) dE. \quad (1.16)$$

Cutler y Mott derivaron el coeficiente Seebeck en la forma conocida como la relación de Mott como [55]

$$S = \frac{1}{\sigma} \frac{k_B}{e} \int \sigma(E) \left(\frac{E - E_F}{k_B T} \right) \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) dE. \quad (1.17)$$

En sistemas dopados degenerados, la ecuación número se simplifica en la conocida forma

$$S = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B}{e} k_B T \left[\frac{d \ln(\sigma(E))}{dE} \right]_{E=E_F}. \quad (1.18)$$

Por lo tanto, para aumentar el coeficiente Seebeck S , está claro que se puede utilizar cualquier efecto que pueda aumentar la dependencia energética de la conductividad $d\sigma(E)/dE$, por ejemplo, aumentando la dependencia energética de la densidad $n(E)$, que depende directamente de la densidad de estados $g(E)$. En comparación con los sistemas tridimensionales (3D) con una dependencia energética típica de la raíz cuadrada de $g(E)$, está claro que los sistemas 2D y especialmente los sistemas 1D y 0D proporcionan una $dg(E)/dE$ mucho mayor que debería reflejarse en S .

1.3. Autosimilaridad

En esta tesis, la auto-similaridad se ha utilizado como una herramienta para crear estructuras multibarreras basadas en grafeno. Las estructuras que se han creado son construidas de dos maneras usando sustratos y campos eléctricos (ver metodología). De cualquier forma, en las dos maneras se ha implementado generaciones de multi-barreras auto-similares.

¿Pero qué es la auto-similaridad? Por definición: La auto-similaridad es el carácter de un objeto que presenta unas similitudes al observarlo a diferentes escalas. Fue el filósofo y matemático G. W. Leibniz quien introdujo el concepto de auto-similitud alrededor de 1700, es decir, la invariancia de la forma durante un cambio de escala espacial. Definirá una línea recta como una curva en la que cada parte es similar al todo y luego describirá las

propiedades de auto-similitud del plano. La invariancia de escala es una forma exacta de auto-similitud en la que, con cualquier aumento, hay una parte más pequeña del objeto que es similar al todo. Por ejemplo, un lado del copo de nieve de Koch es simétrico e invariable en escala; se puede ampliar continuamente sin cambiar de forma.

¿Cómo se construye un objeto auto-similar? El método se basa en un principio iterativo de reducción/duplicación de un objeto inicial [56]. Para construir el objeto auto-similar Von Koch, empezamos desde un segmento horizontal, que dividimos en tres partes iguales. Luego, elevamos la parte central, dividiéndola a su vez en otros dos segmentos de igual longitud, conectados formando un ángulo de 60° , formando un triángulo equilátero; obtenemos en el límite un objeto auto-similar clásico llamado curva de Von Koch (ver la Fig.1.4). Con el mismo principio, se pueden construir otros objetos auto-similares cambiando el factor de reducción, el número de duplicados y la forma de pegar estos duplicados. Las Figuras 1.5 y 1.6 ilustran otros dos ejemplos clásicos de objetos auto-similares.

Como se ha mencionado que las barreras auto-similares se construyen respetando el mismo concepto que Conjunto de Canto o Von Koch.

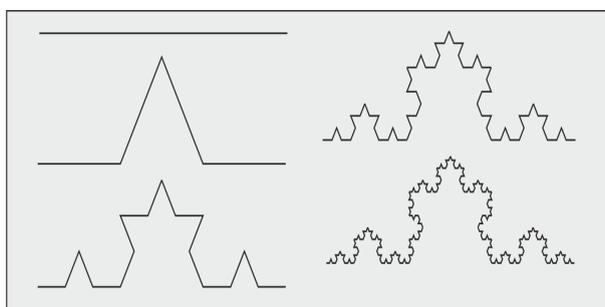


FIGURA 1.3

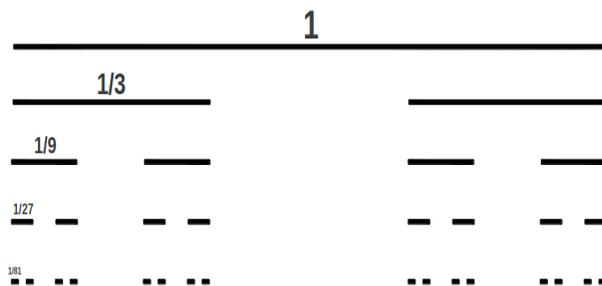


FIGURA 1.4

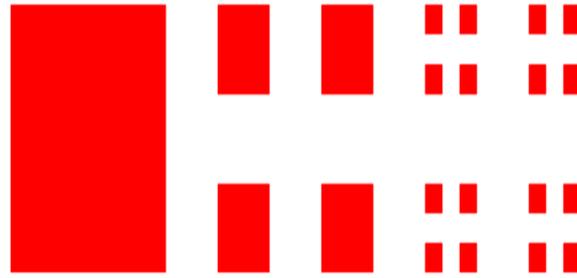


FIGURA 1.5

1.4. Objetivo

- Proponer nuevos sistemas auto-similares basados en monocapa de grafeno.
- Investigar las propiedades de transporte, termoeléctrica en diferentes estructuras auto-similares en una capa de grafeno.
- Investigar reglas de escalamiento en las curvas de transporte (Transmisión, Conductancia, factor de Fano) y termoeléctricas (Coeficiente de Seebeck, Termopotencia) en sistemas auto-similares basados en una capa de grafeno.

Capítulo 2

Metodología

2.1. Matriz de transferencia

En todos los estudios que realizamos se utilizó el método de la matriz de transferencia para obtener el coeficiente de transferencia utilizando el operador de Dirac para grafeno. El método de la matriz de transmisión permite calcular el coeficiente de transmisión de una barrera a la vez. Esta matriz se construye utilizando las funciones propias de los operadores diferenciales considerados, según lo establecido en [23]. Este método se basa en condiciones de continuidad específicas.

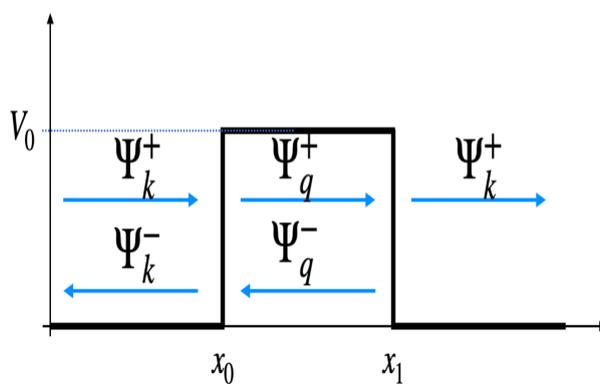


FIGURA 2.1: Perfil de Barrera con las funciones de ondas incidente Ψ^+ y reflejante Ψ^- . k y q son los vectores de onda correspondientes a las regiones de la barrera y del pozo, respectivamente. V_0 es la altura de barrera.

Consideramos el potencial representado por la siguiente ecuación:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{if } x \notin [x_0, x_1] \\ V_0, & \text{if } x \in [x_0, x_1] \\ 0, & \text{if } x \notin [x_0, x_1] \end{cases} . \quad (2.1)$$

El Hamiltoniano de graphene se define dependiendo si las barreras son a base de sustrato o son electrostáticas como: 1) Primer caso la barrera está construida con sustrato, por ejemplo SiC en las regiones de SiO₂ se conserva la estructura cónica de Dirac del grafeno, mientras que en las regiones de SiC la interacción entre la lámina de grafeno y el sustrato provoca una apertura de la banda. La ruptura de la simetría de la subred del grafeno es la razón principal de la apertura del (bandgap) [5]. Los diferentes tamaños de bandgap necesarios para obtener los perfiles no convencionales podrían conseguirse jugando con la terminación de los sustratos.

$$H = v_F \sigma p + \sigma_z V(x), \quad (2.2)$$

donde $V(x) = m(x)v_F^2$ es la altura de barrera con término de masa, v_F^2 , v_F es la velocidad de Fermi, σ representan las matrices de Pauli y p es momento. Las auto-funciones se formulan de esa manera dependiendo de si es la región de barrera o pozo [23]:

$$\Psi_q^\pm(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ v_\pm \end{pmatrix} e^{\pm iq_x x + ik_y y}, \quad (2.3)$$

$$\Psi_k^\pm(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ u_\pm \end{pmatrix} e^{\pm ik_x x + ik_y y}, \quad (2.4)$$

con los elementos u_\pm y v_\pm de las auto-funciones :

$$u_\pm = \pm \text{sign}(E) e^{\pm i\theta}, \quad (2.5)$$

$$v_\pm = \frac{E - V(x)}{\hbar v_F (\pm q_x - ik_y)}, \quad (2.6)$$

cabe mencionar que v_\pm va a depender de la banda prohibida $V = \frac{E_g}{2}$. 2) Segundo caso, barreras electrostáticas, bajo el efecto de esta barrera, el cono de Dirac de la monocapa de grafeno se mueve proporcionalmente a la tensión aplicada V_0 [22]. Los elementos u_\pm y

v_{\pm} de las auto-funciones se definen en este caso:

$$u_{\pm} = \pm \text{sign}(E) e^{\pm i\theta}, \quad (2.7)$$

$$v_j^{\pm} = \frac{\hbar v_F(\pm q_{x,j} + i q_{y,j})}{E - V_{0,j}}. \quad (2.8)$$

Por cualquier caso, las auto-funciones deben cumplir con las siguientes condiciones de continuidad:

$$\Psi_k^{\pm}(x_0) = \Psi_q^{\pm}(x_0), \quad (2.9)$$

$$\Psi_q^{\pm}(x_1) = \Psi_k^{\pm}(x_1). \quad (2.10)$$

Aplicando las condiciones anteriores, obtenemos un sistema de cuatro ecuaciones que involucran constantes arbitrarias α , β , γ , δ , λ y ζ de la siguiente manera:

$$\alpha \Psi_k^+(x_0) + \beta \Psi_k^-(x_0) = \gamma \Psi_q^+(x_0) + \delta \Psi_q^-(x_0), \quad (2.11)$$

$$\gamma \Psi_q^+(x_1) + \delta \Psi_q^-(x_1) = \lambda \Psi_k^+(x_1) + \zeta \Psi_k^-(x_1), \quad (2.12)$$

En forma matricial:

$$\begin{pmatrix} e^{ik_x x_0} & e^{-ik_x x_0} \\ u_+ e^{ik_x x_0} & u_- e^{-ik_x x_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{iq_x x_0} & e^{-iq_x x_0} \\ v_+ e^{iq_x x_0} & v_- e^{-iq_x x_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

$$\begin{pmatrix} e^{iq_x x_1} & e^{-iq_x x_1} \\ v_+ e^{iq_x x_1} & v_- e^{-iq_x x_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik_x x_1} & e^{-ik_x x_1} \\ u_+ e^{ik_x x_1} & u_- e^{-ik_x x_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda \\ \zeta \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

con poco desarrollo se puede sacar γ y δ

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik_x x_0} & e^{-ik_x x_0} \\ u_+ e^{ik_x x_0} & u_- e^{-ik_x x_0} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} e^{iq_x x_0} & e^{-iq_x x_0} \\ v_+ e^{iq_x x_0} & v_- e^{-iq_x x_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix}, \quad (2.15)$$

$$\begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{iq_x x_1} & e^{-iq_x x_1} \\ v_+ e^{iq_x x_1} & v_- e^{-iq_x x_1} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} e^{ik_x x_1} & e^{-ik_x x_1} \\ u_+ e^{ik_x x_1} & u_- e^{-ik_x x_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda \\ \zeta \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

esto permite obtener la amplitud de entrada en función de la amplitud de salida.

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \lambda \\ \zeta \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

La constante ζ es igual cero, porque en la región de la derecha solo se transmite una onda y nada en esta región causa una reflexión. Finalmente, la matriz de transferencia M se escribe:

$$M(E, \Delta x, V) = \begin{pmatrix} M_{11}(E, \Delta x, V) & M_{12}(E, \Delta x, V) \\ M_{21}(E, \Delta x, V) & M_{22}(E, \Delta x, V) \end{pmatrix}, \quad (2.18)$$

los elementos de matriz de transferencias vienen como:

$$M_{11}(E, \Delta x, V) = N(A + B)e^{-iq_x(x_1 - x_0)}, \quad (2.19)$$

donde A , B y N son:

$$A = (v_- - u_+)(u_- - v_+)e^{-iq_x(x_1 - x_0)},$$

$$B = (u_- - v_-)(u_+ - v_+)e^{iq_x(x_1 - x_0)},$$

$$N = 1/(u_- - u_+)(v_- - v_+).$$

$$M_{12}(E, \Delta x, V) = 2Ni \sin(q_x(x_1 - x_0))(u_- - v_+)(u_- - v_-)e^{-ik_x(x_1 + x_0)}. \quad (2.20)$$

$$M_{21}(E, \Delta x, V) = 2Ni \sin(q_x(x_1 - x_0))(v_- - u_+)(u_+ - v_+)e^{ik_x(x_1 + x_0)}. \quad (2.21)$$

$$M_{22}(E, \Delta x, V) = N(C + D)e^{-ik_x(x_1 - x_0)}, \quad (2.22)$$

donde C y D son:

$$C = (v_+ - u_+)(v_- - u_-)e^{-iq_x(x_1 - x_0)},$$

$$D = (u_- - v_+)(v_- - u_+)e^{iq_x(x_1 - x_0)}.$$

La matriz de transferencia por n barreras:

$$M(E; \Delta x, V) = \prod_{j=1}^n M(E; \Delta x, V_j). \quad (2.23)$$

2.1.1. Coeficiente de transmisión

El método de la matriz de transferencia permite calcular el coeficiente de transmisión para una única barrera; Sin embargo, utilizando la ecuación 2.23, es posible calcular la matriz de transferencia para un sistema multibarrera y derivar el coeficiente de transmisión. Definimos el coeficiente de transmisión como en [23, 57], por:

$$T(E) = \frac{1}{|M_{11}|^2}. \quad (2.24)$$

2.1.2. Conductividad

A partir del coeficiente de transmisión se puede calcular la conductancia [51] que está definida con:

$$\mathbb{G}(E_F^*) = \frac{G}{G_0} = E_F^* \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} T(E_F^*, \theta) \cos \theta d\theta, \quad (2.25)$$

aquí $E_F^* = \frac{E_F}{V_0}$ es la energía de Fermi normalizada a la altura de la barrera, $G_0 = \frac{2e^2 L_y E_0}{\hbar^2 v_F}$ es el factor constante de conducción, L_y es el ancho del sistema en la dirección horizontal y , θ es el ángulo de incidencia del electrón con respecto a la dirección de propagación x .

2.1.3. Termoelectricidad

Podemos concluir a partir de la conductancia el coeficiente de Seebeck [55]:

$$S(E_F^*) = S_0 \left. \frac{\partial [\ln \mathbb{G}(E^*)]}{\partial E^*} \right|_{E^*=E_F^*}, \quad (2.26)$$

con $S_0 =$

Finalmente, es interesante mencionar que debido a la forma de la matriz de transferencia considerada, es necesario utilizar simulación numérica, ya que los elementos de la matriz para estructuras con dos o más barreras son muy complejos para poder operar y analizar.

2.1.4. Estados casi-localizados

Esta tesis investigó los estados casi localizados en grafeno utilizando una estructura con una barrera (ver Fig.2.1) y dos barreras del campo eléctrico. Se ha usado la matriz de transferencia, y las condiciones de continuidad para determinar primero las amplitudes de la función de onda en cada región barrera y pozo respectivamente, luego la función de densidad de probabilidad a lo largo de distancia x . La metodología es detallada comenzando a definir la siguiente ecuación de Dirac:

$$[v_F(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) + V_0 \sigma_z] \psi = E \psi. \quad (2.27)$$

Representamos la función de onda correspondiente a la región de barrera:

$$\psi_{q\pm}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ v_{\pm} \end{pmatrix} e^{\pm iq_x x + iq_y y}, \quad (2.28)$$

el componente de la función onda:

$$v_{\pm} = \frac{\hbar v_F(\pm q_x - q_y)}{E - V_0}. \quad (2.29)$$

La función onda en el caso de pozo:

$$\psi_{k\pm}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ u_{\pm} \end{pmatrix} e^{\pm ik_x x + ik_y y}, \quad (2.30)$$

con su componente:

$$u_{\pm} = \pm s e^{\pm i\theta}. \quad (2.31)$$

Usando las condiciones de frontera, calculamos los coeficientes: $A_0, B_0, A_1, B_1, A_2, B_2$.

$$A_0 \psi_k^+(x_0) + B_0 \psi_k^-(x_0) = A_1 \psi_q^+(x_0) + B_1 \psi_q^-(x_0), \quad (2.32)$$

$$A_1 \psi_q^+(x_1) + B_1 \psi_q^-(x_1) = A_2 \psi_k^+(x_1) + B_2 \psi_k^-(x_1). \quad (2.33)$$

Desde inicio posamos que $A_0 = 1$ y suponemos que $B_2 = 0$ porque después la barrera no hay onda reflejada. Transformando el sistema (2.34) y (2.35) en forma matricial:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ u_+ \end{pmatrix} e^{+ik_x x_0} + B_0 \begin{pmatrix} 1 \\ u_- \end{pmatrix} e^{-ik_x x_0} = A_1 \begin{pmatrix} 1 \\ v_+ \end{pmatrix} e^{+iq_x x_0} + B_1 \begin{pmatrix} 1 \\ v_- \end{pmatrix} e^{-iq_x x_0}, \quad (2.34)$$

$$A_1 \begin{pmatrix} 1 \\ v_+ \end{pmatrix} e^{+iq_x x_1} + B_1 \begin{pmatrix} 1 \\ v_- \end{pmatrix} e^{-iq_x x_1} = A_2 \begin{pmatrix} 1 \\ u_+ \end{pmatrix} e^{+ik_x x_1}, \quad (2.35)$$

$$\begin{pmatrix} e^{+ik_x x_0} & e^{-ik_x x_0} \\ u_+ e^{+ik_x x_0} & u_- e^{-ik_x x_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{+iq_x x_0} & e^{-iq_x x_0} \\ v_+ e^{+iq_x x_0} & v_- e^{-iq_x x_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \quad (2.36)$$

$$\begin{pmatrix} e^{+iq_x x_1} & e^{-iq_x x_1} \\ v_+ e^{+iq_x x_1} & v_- e^{-iq_x x_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{+ik_x x_1} & e^{-ik_x x_1} \\ u_+ e^{+ik_x x_1} & u_- e^{-ik_x x_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.37)$$

Para escribir las funciones de onda en cada región transformamos las matrices (2.30) y (2.31) en esa forma:

$$\begin{pmatrix} e^{+ik_x x_0} + B_0 e^{-ik_x x_0} \\ u_+ e^{+ik_x x_0} + B_0 u_- e^{-ik_x x_0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 e^{+iq_x x_0} + B_1 e^{-iq_x x_0} \\ A_1 v_+ e^{+iq_x x_0} + B_1 v_- e^{-iq_x x_0} \end{pmatrix}, \quad (2.38)$$

$$\begin{pmatrix} A_1 e^{+iq_x x_1} + B_1 e^{-iq_x x_1} \\ A_1 v_+ e^{+iq_x x_1} + B_1 v_- e^{-iq_x x_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_2 e^{+ik_x x_1} \\ A_2 u_+ e^{+ik_x x_1} \end{pmatrix}. \quad (2.39)$$

Para el cálculo de los coeficientes B_0, A_1, B_1, A_2 hemos usado la matriz de transferencia representada con los coeficientes:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.40)$$

Una vez tenemos los coeficientes de la matriz de transferencia se determinan A_2 y B_0 :

$$A_2 = \frac{1}{M_{11}}, \quad (2.41)$$

$$B_0 = \frac{M_{21}}{M_{11}}. \quad (2.42)$$

Para poder calcular A_1 y B_1 se necesita desarrollar las ecuaciones (2.38) y (2.39), para poder sacarlos:

$$\begin{pmatrix} e^{+ik_x x_0} & e^{-ik_x x_0} \\ u_+ e^{+ik_x x_0} & u_- e^{-ik_x x_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{+iq_x x_0} & e^{-iq_x x_0} \\ v_+ e^{+iq_x x_0} & v_- e^{-iq_x x_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (2.43)$$

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{+iq_x x_0} & e^{-iq_x x_0} \\ v_+ e^{+iq_x x_0} & v_- e^{-iq_x x_0} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} e^{+ik_x x_0} & e^{-ik_x x_0} \\ u_+ e^{+ik_x x_0} & u_- e^{-ik_x x_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad (2.44)$$

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{v_- - v_+} \begin{pmatrix} v_- e^{-iq_x x_0} & -e^{-iq_x x_0} \\ -v_+ e^{+iq_x x_0} & e^{+iq_x x_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{+ik_x x_0} & e^{-ik_x x_0} \\ u_+ e^{+ik_x x_0} & u_- e^{-ik_x x_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad (2.45)$$

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{v_- - v_+} \begin{pmatrix} (v_- - u_+) e^{ix_0(k-q)} & (v_- - u_-) e^{-ix_0(k+q)} \\ (u_+ - v_+) e^{ix_0(k+q)} & (u_- - v_+) e^{ix_0(k-q)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad (2.46)$$

$$A_1 = \frac{1}{v_- - v_+} [(v_- - u_+) e^{ix_0(k-q)} + B_0 (v_- - u_-) e^{-ix_0(k+q)}], \quad (2.47)$$

$$B_1 = \frac{1}{v_- - v_+} [(u_+ - v_+) e^{ix_0(k+q)} + B_0 (u_- - v_+) e^{ix_0(k-q)}]. \quad (2.48)$$

Cabe mencionar que las amplitudes siguientes $B_0 = \frac{M_{21}}{M_{11}}$ y $A_2 = \frac{1}{M_{11}}$ A_2 se calculan usando la matriz de transferencia y se colocan en las dos ecuaciones:

$$A_1 = \frac{1}{v_- - v_+} [(v_- - u_+)e^{ix_0(k-q)} + \frac{M_{21}}{M_{11}}(v_- - u_-)e^{-ix_0(k+q)}], \quad (2.49)$$

$$B_1 = \frac{1}{v_- - v_+} [(u_+ - v_+)e^{ix_0(k+q)} + \frac{M_{21}}{M_{21}}(u_- - v_+)e^{ix_0(k-q)}]. \quad (2.50)$$

Una vez determinadas todas las amplitudes de la función de onda, se puede calcular la función de densidad de probabilidad correspondiente a cada región de la barrera y el pozo: La Región (I) representa ante barrera:

$$\psi_I(x) = \begin{pmatrix} e^{+ik_x x_0} + B_0 e^{-ik_x x_0} \\ u_+ e^{+ik_x x_0} + B_0 u_- e^{-ik_x x_0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_1(x) \\ \phi_2(x) \end{pmatrix}, \quad (2.51)$$

$$|\psi_I(x)|^2 = |\phi_1(x)|^2 + |\phi_2(x)|^2. \quad (2.52)$$

La Región (II) representa la barrera:

$$\psi_{II_i}(x) = \begin{pmatrix} A_1 e^{+iq_x x_0} + B_1 e^{-iq_x x_0} \\ A_1 v_+ e^{+iq_x x_0} + B_1 v_- e^{-iq_x x_0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \end{pmatrix}, \quad (2.53)$$

$$|\psi_{II_i}(x)|^2 = |\varphi_1(x)|^2 + |\varphi_2(x)|^2. \quad (2.54)$$

$$\psi_{II_{ii}}(x) = \begin{pmatrix} A_1 e^{+iq_x x_1} + B_1 e^{-iq_x x_1} \\ A_1 v_+ e^{+iq_x x_1} + B_1 v_- e^{-iq_x x_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_1(x) \\ \chi_2(x) \end{pmatrix}, \quad (2.55)$$

$$|\psi_{II_{ii}}(x)|^2 = |\chi_1(x)|^2 + |\chi_2(x)|^2. \quad (2.56)$$

La región (III) representa el pozo:

$$\psi_{III}(x) = \begin{pmatrix} A_2 e^{+ik_x x_1} \\ A_2 u_+ e^{+ik_x x_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \eta_1(x) \\ \eta_2(x) \end{pmatrix}, \quad (2.57)$$

$$|\psi_{III}(x)|^2 = |\eta_1(x)|^2 + |\eta_2(x)|^2. \quad (2.58)$$

La función onda se normaliza con el ancho del sistema L_t :

$$\int_0^{L_t} c |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (2.59)$$

$$\int_0^{x_1} c |\psi_I(x)|^2 dx + \int_{x_1}^{x_2} c |\psi_{II}(x)|^2 dx + \int_{x_2}^{L_t} c |\psi_{III}(x)|^2 dx = 1 \quad (2.60)$$

$$c = \frac{1}{\int_0^{L_t} |\psi(x)|^2 dx} \quad (2.61)$$

Finalmente, se multiplica la función de densidad de probabilidad por c en cada región.

Capítulo 3

Resultados

3.1. Propiedades de auto-similaridad en el coeficiente de transmisión

En este estudio, se investigó un sistema de múltiples barreras autosimilar, utilizando la proporción áurea como factor de escala para la altura de las barreras. Se buscan patrones auto-similares y reglas de escalamiento que restituyen el coeficiente de transmisión escalable. Los resultados obtenidos muestran un patrón de auto-similaridad con nuevas reglas de escalamiento. Esas reglas son capaces de conectar el coeficiente de transmisión de varias generaciones de la estructura.

En primer lugar, damos una breve descripción de cómo construir el sistema multi-barrera auto-similar. Comience con una línea de segmento de longitud L_x . Se divide en tercios y se coloca una barrera rectangular de energía (altura) V_0 y anchura $\frac{L_x}{3}$ en el tercio central, lo que se denomina generación una g_1 (Fig. 3.1 (a)). La generación dos g_2 se construye a partir de la primera generación, tomando los segmentos restantes y dividiéndolos en tercios. Ahora se coloca una barrera rectangular de energía $\frac{V_0}{\Phi}$ y anchura $\frac{L_x}{3^2}$ en el tercio medio de cada segmento (Fig. 3.1 (b)). La barrera de la generación anterior se escala en $\frac{1}{3}$, pero solo en su anchura. Repetimos este proceso para la tercera generación, dividiendo cada segmento por $\frac{1}{3^3}$ y colocando barreras de energía $\frac{V_0}{\Phi^2}$ en los tercios medios correspondientes (Fig. 3.1 (c)). Una vez más, las barreras de la generación anterior se escalan por $\frac{1}{3}$ solo en su anchura. Para una generación N ésima, las barreras correspondientes tienen una anchura $\frac{L_x}{3^N}$ y una energía $\frac{V_0}{\Phi^N}$.

En este trabajo, establecemos la longitud total del sistema $L_x = 3500 \text{ \AA}$ y la altura de la barrera principal $V_0 = 1.0 \text{ eV}$.

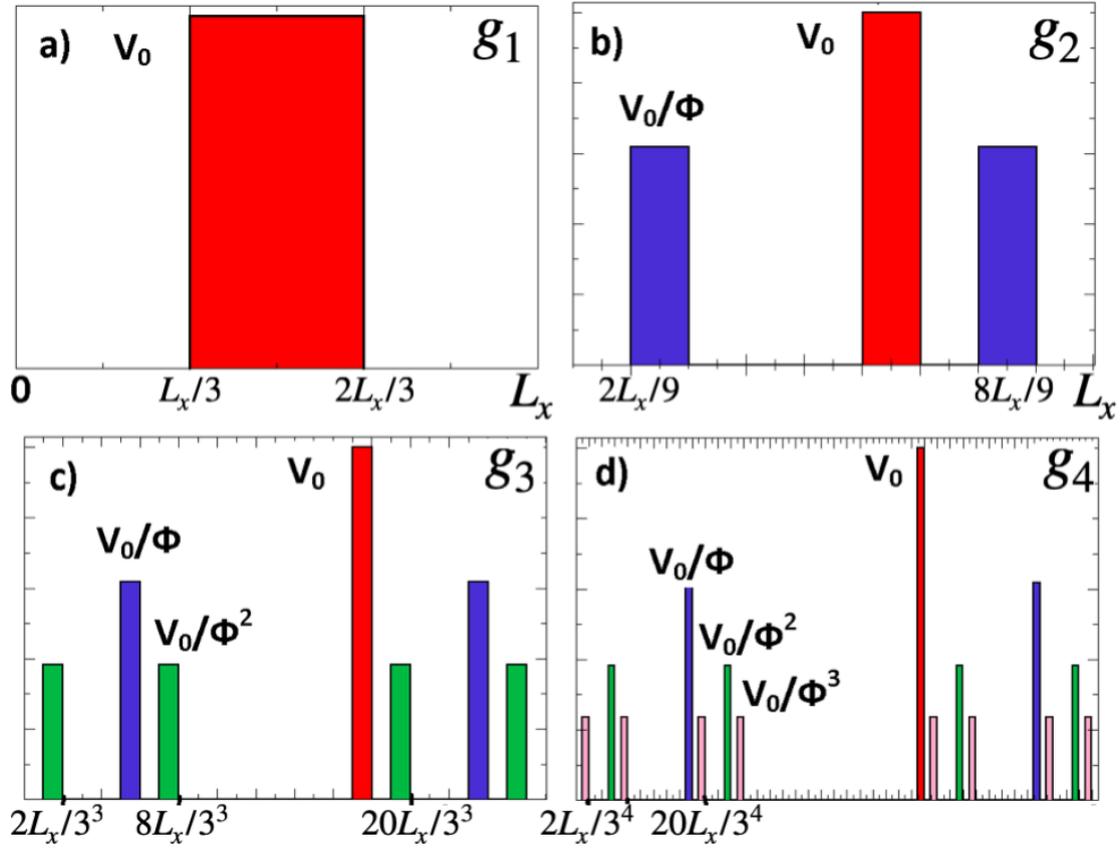


FIGURA 3.1: Construcción de las cuatro primeras generaciones del sistema multibarrera auto-similar. (a), (b), (c) y (d) corresponden a las generaciones 1, 2, 3 y 4 respectivamente. Cada barrera se escala en su anchura con $1/3^N$ y su altura en razón áurea ($1/\Phi^{N-1}$).

Las barreras se generan por la interacción entre el sustrato y la monocapa de grafeno. En concreto, el sustrato de carburo de silicio SiC en este caso juega un papel importante, puede cambiar la relación de dispersión a la forma parabólica y abrir una banda prohibida (gap) en el espectro de energía [58, 59].

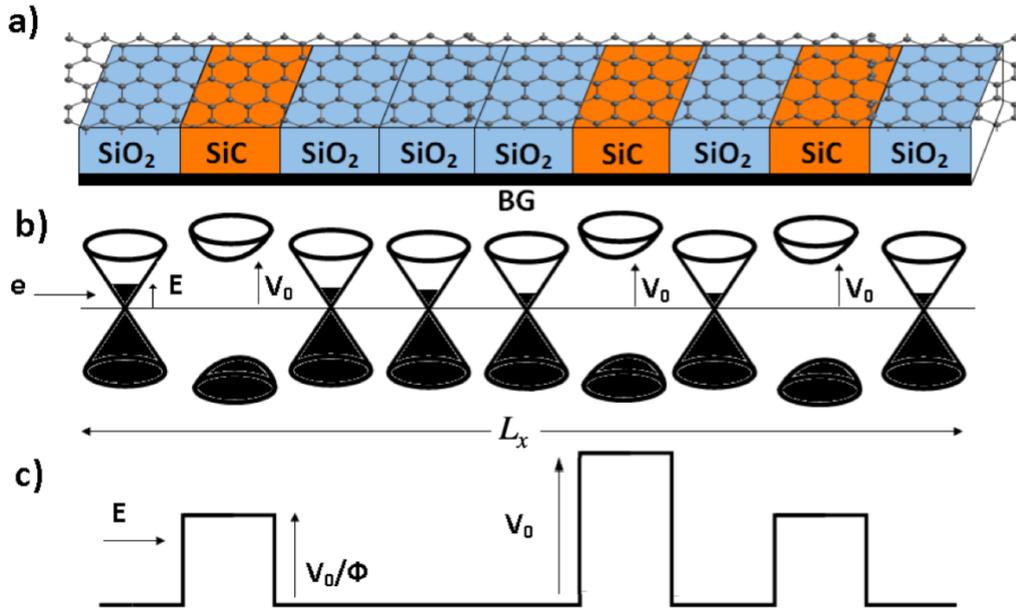


FIGURA 3.2: Representación gráfica de la generación g_2 de estructura multibarrera auto-similar en grafeno. (a) La lámina de grafeno se deposita sobre sustratos alternados, como SiO_2 (losas azules) y SiC (losas naranjas), indican respectivamente las regiones donde hay barreras y pozos, (b) Las distribuciones del cono de Dirac y del paraboloide de Dirac a lo largo de la estructura son regiones de relaciones de dispersión lineal y parabólica, respectivamente. (c) Perfil de potencial de la estructura, la barrera principal tiene una altura V_0 , las barreras secundarias tienen una altura V_0/Φ y todas las barreras tienen una anchura $L_x/3^2$ [60].

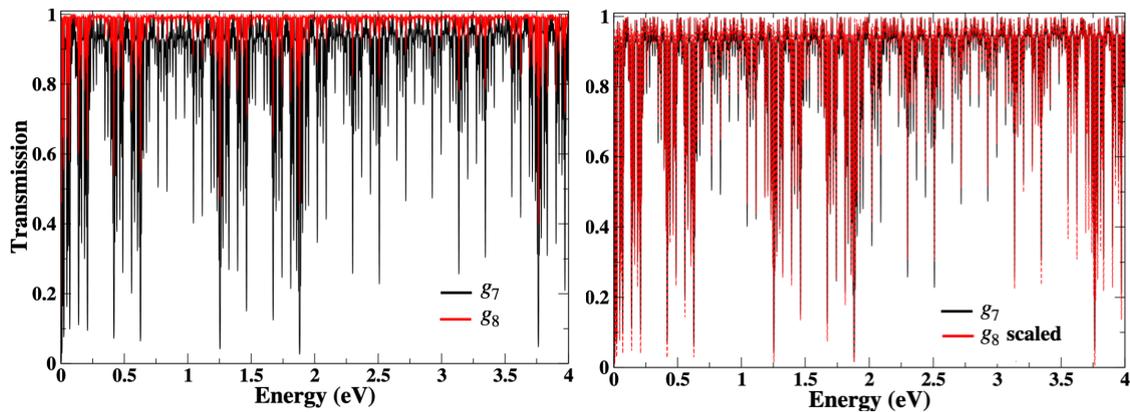


FIGURA 3.3: Escala del coeficiente de transmisión en función de la energía. (a) Curvas de transmisión para las generaciones g_7 y g_8 . (b) Las mismas curvas, pero en este caso, g_8 está escalado por una transformación matemática, ver el texto. La altura de las barreras $V_0 = 1.0$ eV, y la longitud total es $L_x = 3500$ Å [60].

En primer lugar, es importante enfatizar que el propósito de este estudio es determinar si el espectro de transmitancia tiene propiedades de escalamiento, especialmente los

siguientes tres parámetros: Entre generaciones g_i y g_{i+1} , dos alturas de la barrera principal V_{0_i} y $V_{0_{i+1}}$, dos longitudes totales del sistema L_{x_i} y $L_{x_{i+1}}$. Por lo tanto, investigamos las posibles relaciones entre las curvas de transmisión, el estudio muestra resultados interesantes para las generaciones especiales 6, 7 y 8. La Fig. 3.3 muestra el coeficiente de transmisión en función de la energía para las generaciones 7 y 8. En particular, la Fig. 3.3 (b) presenta la transmisión escalada de g_8 . Podemos notar claramente que las curvas de transmisión g_7 y g_8 son idénticas, esto después de aplicar una transformación matemática. Esta transformación es, simplemente $T_{g_7}(E) \simeq [T_{g_8}(E)]^6$, donde los subíndices son los números de generación y los superíndices son el factor de escala entre dos generaciones, como se muestra en la Fig. 3.3 (b). Cabe mencionar que hemos encontrado una expresión general para $g \geq 6$, relacionando el coeficiente de transmisión entre dos generaciones sucesivas como:

$$T_{g_i}(E) \simeq [T_{g_{i+1}}(E)]^6. \quad (3.1)$$

Esto significa que las curvas de transmisión están relacionadas por una potencia determinada, pero difieren solo en el número de barreras. Esto muestra que las curvas de transmisión siguen una regla de escala que refleja autosimilitud. Esto confirma nuevamente la autosimilaridad reflejada en las propiedades físicas del grafeno como en [12, 21]. Por lo tanto, encontramos la regla de escala entre las curvas de transmisión correspondientes a diferentes generaciones. En consecuencia, es importante investigar la existencia de reglas de escala para otros parámetros como la energía de la barrera y la longitud total del sistema, como se esperaba.

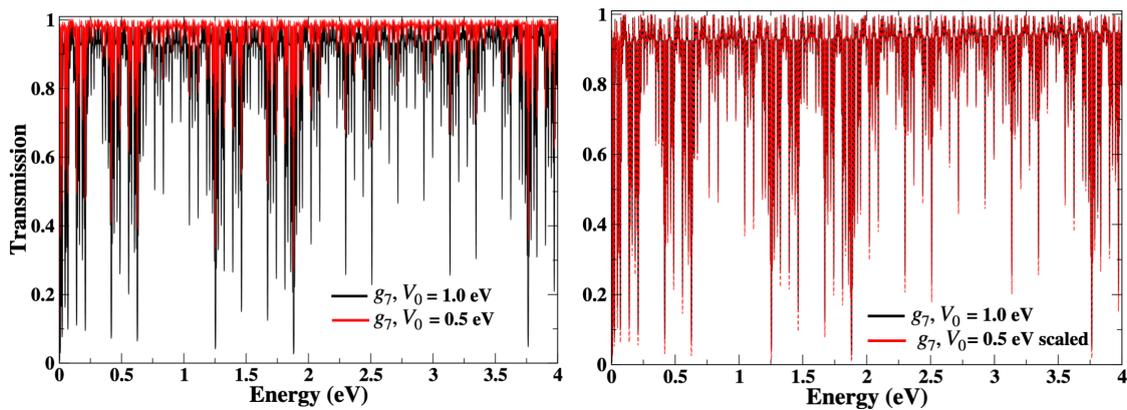


FIGURA 3.4: Escala de transmisión de la generación g_7 para diferentes alturas de la barrera principal. (a) Transmisión de $V_0 = 0.5 \text{ eV}$ y $V_0 = 1.0 \text{ eV}$. (b) En este caso la curva correspondiente a $V_0 = 0.5 \text{ eV}$ se transforma mediante una regla de escalado [60].

Ahora buscaremos otra transformación matemática, en función de la energía de la barrera principal (altura). Tomemos una generación fija, por ejemplo, generación g_7 y dos

energías: $V_0 = 0.5, 1.0$ eV (ver Fig. 3.4(a)). Si la curva de transmisión correspondiente a la energía $V_0 = 0.5$ eV se eleva a la potencia 4, se obtiene la curva de transmisión correspondiente a $V_0 = 1.0$ eV (Fig. 3.4(b)). Por lo tanto, según esta transformación obtenemos la ecuación $T_{V_{1.0}}(E) \simeq [T_{V_{0.5}}(E)]^4$. De hecho, esta regla de escala es más general, se aplica a cada múltiplo de dos. También hemos demostrado para el parámetro de energía de barrera principal que las curvas correspondientes a la misma generación, pero diferente energía de barrera principal coinciden. Esto también muestra que las curvas de transmisión están relacionadas por una transformación de escala que da como resultado una forma más general:

$$T_{V_0}(E) \simeq \left[T_{\frac{1}{\beta}V_0}(E) \right]^{\beta^2}. \quad (3.2)$$

Donde el factor β es un factor que viene en múltiplos de dos.

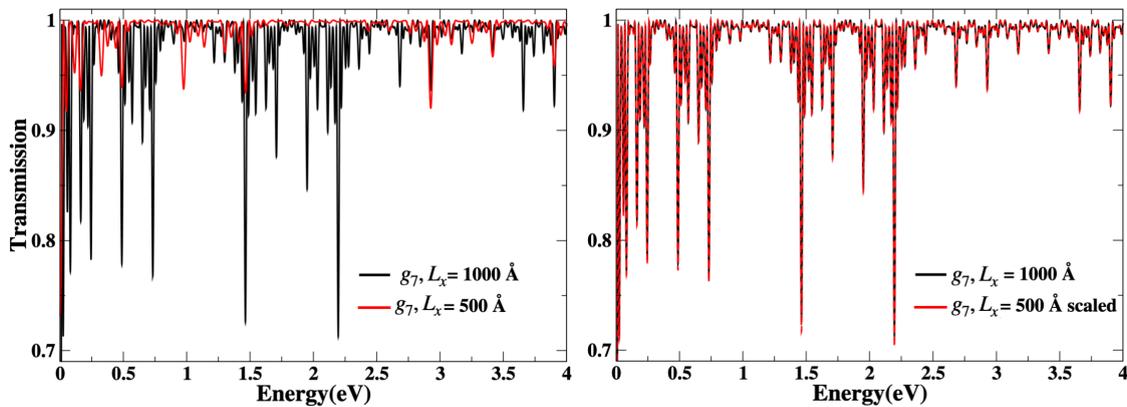


FIGURA 3.5: Escalado entre diferentes longitudes totales de generación g_7 . (a) Curvas de transmisión con $L_x = 500, 1000$ Å. (b) En este caso se escala la curva correspondiente a $L_x = 500$ Å [60].

Trabajando en el tercer parámetro para la longitud total y tratando de encontrar una regla de escala para diferentes L_x , primero elevamos la curva que corresponde a $L_x = 500$ Å a la cuarta potencia y dividimos su energía por dos. De acuerdo con esto, obtenemos la ecuación $T_{1000}(E) \simeq [T_{500}(E)]^4$ (ver Fig. 3.5(b)). Además, mostramos nuevamente que las curvas están relacionadas por una transformación de escala para diferentes longitudes totales.

$$T_{L_x}(E) \simeq \left[T_{\frac{1}{\gamma}L_x} \left(\frac{1}{\gamma}E \right) \right]^{\gamma^2}, \quad (3.3)$$

donde el factor γ es un factor que viene en múltiplos de dos.

Finalmente, podemos obtener una buena aproximación combinando (3.1), (3.2) y (3.3).

De hecho, todos los parámetros y la energía variable serán argumentos de la transmisión.

$$T(E, g_i, V_0, L_x) \simeq \left[T \left(\frac{1}{\gamma} E, g_{i+m}, \frac{1}{\beta} V_0, \frac{1}{\gamma} L_x \right) \right]^{6^m (\gamma\beta)^2}, \quad (3.4)$$

donde m es la diferencia entre generaciones, y los factores γ y β es un factor que viene en múltiplos de dos. Esta regla general es muy útil para predecir la transmisión en función de los parámetros mencionados. Cabe mencionar que no se encontró ninguna regla de escala cuando la proporción áurea también se usó como factor de escala para el ancho.

3.2. Propiedades de auto-similaridad en el Factor de Fano

En este trabajo investigamos el factor Fano y la conductancia en dos tipos de estructuras auto-similares basadas en grafeno. La primera estructura se denomina (SSP) es un sistema multibarreras donde las barreras están construidas por sustratos alternos (ver Fig. 3.6), de hecho es lo mismo que la Fig. 3.2 y otro sistema, las barreras son electrostáticas (SEP) en este caso es diferente que primer estructura porque no hay gap las barreras aquí son electrostáticas hacen que el cono de Dirac se desplaza como se muestra en la Fig. 3.7. La estructura SSP pertenece a las pocas estructuras en las que manifiestan un comportamiento auto-similar. Además, reportamos un valor máximo universal del factor Fano igual a $1/3$ en los potenciales electrostáticos auto-similares. Se hizo más análisis en términos del número de generaciones, altura de la barrera principal y longitudes totales de la estructura. Se consideró que el Hamiltoniano de Dirac describe el comportamiento de los electrones de Fermi a través de una estructura auto-similar. El formalismo de la matriz de transferencia se usa para cada generación de estructura, así como el formalismo de Landauer-Büttiker para calcular la conductancia y el factor de Fano. Nuestros resultados demostraron las características de auto-similaridad en el factor de Fano y la conductancia. Además, obtuvimos las reglas de escala que representan la escala de invariancia entre las generaciones de la estructura.

El objetivo es explorar el comportamiento auto-similar y las reglas de escala en el factor Fano así como las curvas de conductancia para tres parámetros fundamentales: Generación g_i , altura de las barreras V_0 , y longitud de la estructura L_x . Por lo tanto, calculamos la conductancia sumando todos los canales de transmisión (ver Ec. 2.17). Luego, calculamos

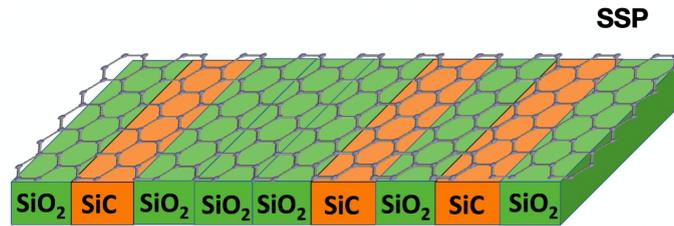


FIGURA 3.6: Representación gráfica de las barreras auto-similares basadas en el sustrato SSP. Esta estructura se genera por la interacción entre el sustrato y la capa de grafeno. La capa de grafeno se deposita sobre sustratos alternantes, como SiO_2 (losas verde claro) y SiC (losas naranja), obteniéndose regiones con relaciones de dispersión lineal y parabólica [22], respectivamente. Esta estructura presenta la segunda generación (g_2).

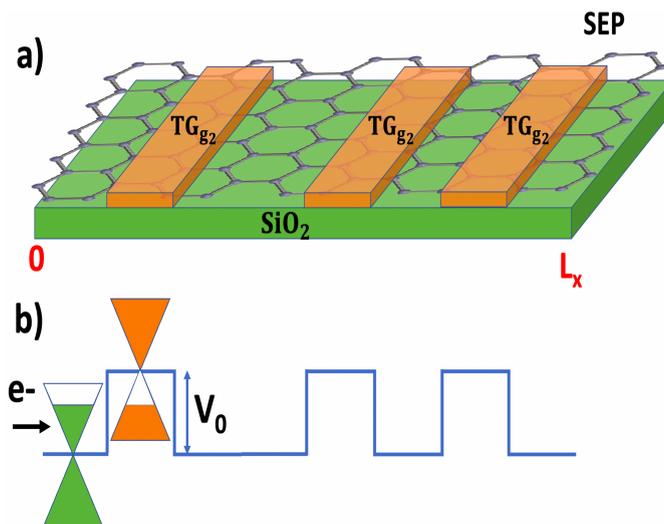


FIGURA 3.7: Representación gráfica de la estructura de grafeno auto-similar electrostática SEP. Esta estructura se crea cuando se coloca una lámina de grafeno sobre un sustrato que no interactúa, como SiO_2 (azul claro) y láminas superiores alternas (láminas naranjas). Esta estructura representa la segunda generación (g_2).

el factor de Fano utilizando (Ec. 2.20). Primero, investigamos las propiedades de auto-similaridad, la invariancia de escala en las curvas de la conductancia y el factor de Fano para SSP como se muestra en la Fig.3.6. En segundo lugar, estudiamos el factor de Fano para SEP (ver la Fig. 3.7) y lo analizamos en términos de los tres parámetros fundamentales, como se mencionó anteriormente.

Fig.3.8 muestra la conductancia y el comportamiento del factor Fano en función de la energía de Fermi. Analizamos la conductancia para dos generaciones (g_7, g_8) como se ve en la Fig.3.8(a). Se observó que las curvas de conducción tienen casi el mismo comportamiento para ambas generaciones (g_7, g_8). Además, la conductancia de las dos generaciones aumenta cuando aumenta la energía de Fermi, mientras que el factor de Fano disminuye, como se muestra en las Figs. 3.8(a) y 3.8(c). Además, observamos otra

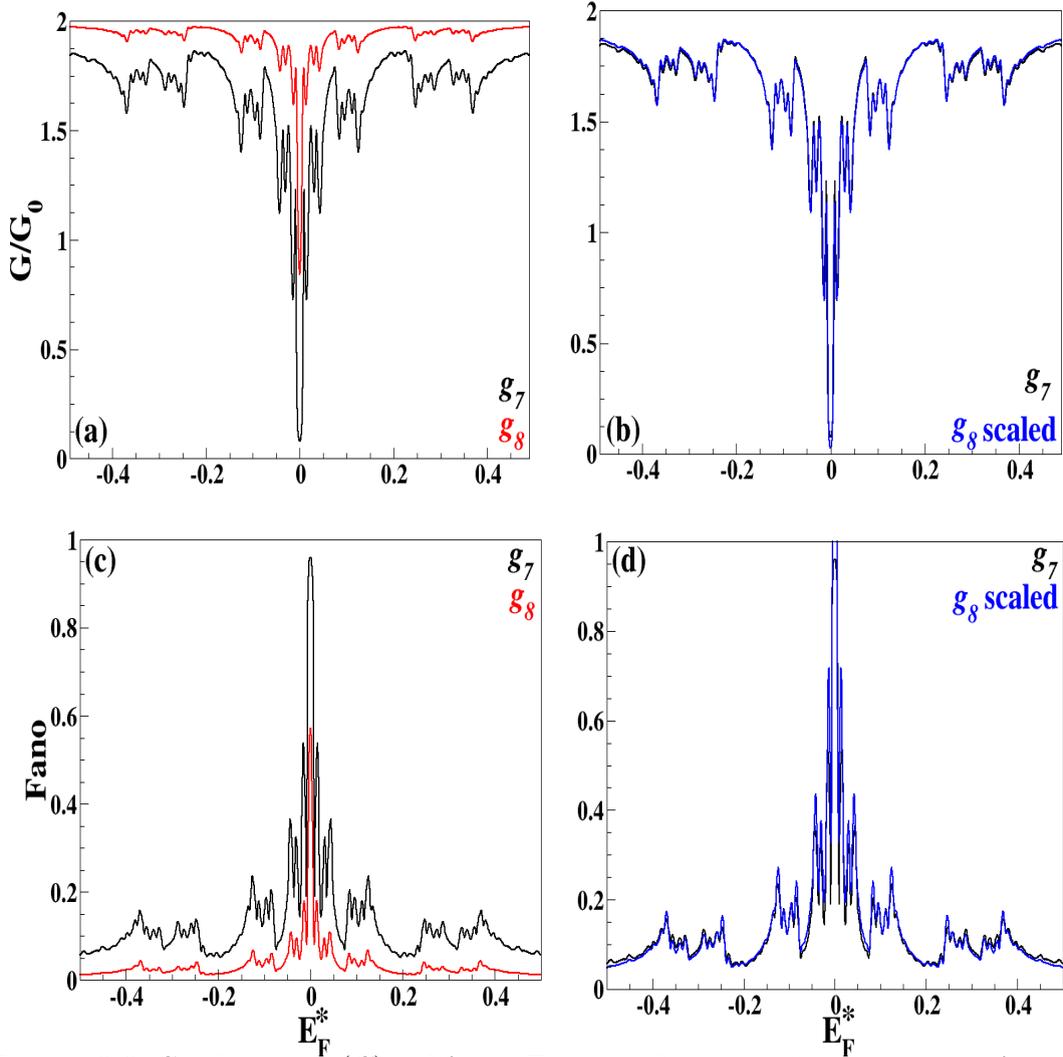


FIGURA 3.8: Conductancia (G) y el factor Fano para las generaciones g_7 y g_8 en función de la energía de Fermi para la estructura SSP. (a), (b) son la conductancia por las generaciones (g_7, g_8). En el caso de (b), la curva corresponde a g_7 sigue siendo la misma que en (a). Sin embargo, se escala la curva que corresponde a g_8 . (c), (d) son generaciones de factores Fano (g_7, g_8). En el caso de (d), se escala la curva que corresponde a g_8 . La altura de la barrera principal es $V_0 = 0.2$ eV, y la longitud total del sistema es $L_x = 10000$ Å [61].

característica que el mínimo de la conductancia coincide bien con el máximo del factor Fano.

Las figuras 3.8(a) y 3.8(b) tienen los mismos parámetros. Sin embargo, la curva correspondiente de g_8 se escala mediante una transformación matemática para encontrar el factor de escala que conecta las dos generaciones (g_7, g_8). La transformación matemática aplicada viene dada por: $\mathbb{G}_{g_7}(E_F^*) \approx [\mathbb{G}_{g_8}(E_F^*)]^6 / (2)^5$, donde $\mathbb{G} = G/G_0$ y el subíndice (g_7, g_8) denota el número de generación. Para investigar el comportamiento auto-similar en el factor Fano, conectamos la generación (g_7 y g_8). La figura 3.8(c) muestra el factor

de Fano en función de la energía de Fermi. Las figuras 3.8(c) y 3.8(d) tienen los mismos parámetros. Sin embargo, la curva correspondiente a g_8 también está escalada. La transformación matemática en este caso se expresa como: $F_{g_7} = 4F_{g_8}$, esta transformación de escala permite conectar dos generaciones sucesivas (g_i, g_{i+1}). Cabe mencionar que los dos factores (6) y (2^5) en el caso de la conductancia representan el factor de escalamiento que conecta distintas generaciones de la estructura. De lo contrario, encontramos que el número (4) es el factor de escalamiento para el caso del factor Fano. En este sentido, estas transformaciones matemáticas mencionadas se denominaron reglas de escala. Representan el comportamiento auto-similar antes mencionado. En general, la regla de escalamiento une dos generaciones sucesivas (g_i, g_{i+1}). Asimismo, propusimos una expresión general de la regla de escala para el caso de la conductancia, así como del factor Fano. Para el caso de conductancia, la regla se expresa como:

$$\mathbb{G}_{g_i}(E_F^*) \approx \frac{[\mathbb{G}_{g_{i+p}}(E_F^*)]^{\beta^p}}{(2)^{\beta^p - 1}}, \quad (3.5)$$

donde β es el factor de escala que es igual a 6, i es el número de generación y p es la diferencia entre generaciones.

Mientras que, para el caso del factor Fano, la regla de escalamiento estará dada por:

$$F_{g_i}(E_F^*) \approx \beta^p F_{g_{i+p}}(E_F^*), \quad (3.6)$$

donde β es igual a 4.

Fig.3.9 muestra el factor de Fano en función de la energía de Fermi para dos alturas de la barrera principal, así como diferentes longitudes totales de la estructura. En este caso, investigamos la auto-similitud entre dos alturas y dos longitudes totales. Por lo tanto, graficamos la generación, g_7 por ejemplo, para dos alturas de la barrera principal (*i.e.*: $V_0 = 0.2, 0.1$ eV), como se muestra en la Fig. 3.9(a). Sin embargo, en la Fig. 3.9(b), la conexión de las dos alturas de las barreras principales se ha logrado a través de una transformación matemática que viene como: $F_{g_7, V_{0.2}}(E_F^*) = 3F_{g_7, V_{0.1}}(E_F^*)$ donde 3 representa el factor de escala que relaciona ambas curvas. Como resultado, la conexión de las dos alturas de la barrera principal demostró la existencia de un comportamiento auto-similar en este caso. En este sentido, la transformación matemática se considera como una regla de escala que se puede generalizar de la siguiente manera:

$$F_{g_i, V_0}(E_F^*) \approx \beta^p F_{g_i, V_0/2}(E_F^*), \quad (3.7)$$

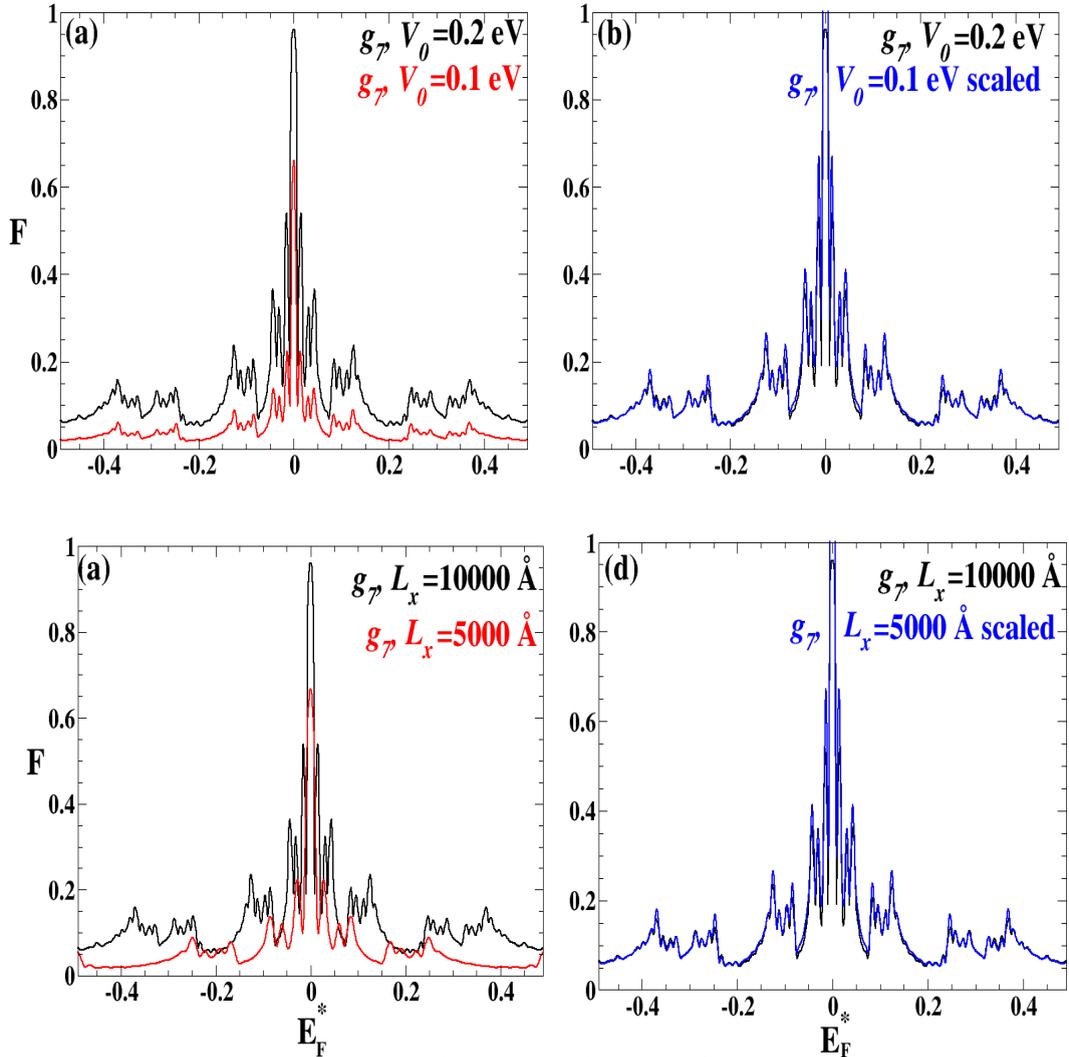


FIGURA 3.9: Factor de Fano para la generación g_7 en función de la energía de Fermi en las barreras auto-similares basadas en sustrato. (a) y (b) son factores de Fano entre dos alturas de la barrera de la red ($V_0=0.2$ y 0.1 eV). En el caso de (b), la curva de $V_0 = 0.2$ eV sigue siendo la misma que en (a). Sin embargo, se escala una curva que corresponde a $V_0 = 0.1$ eV. (c) y (d) son factores de Fano entre dos longitudes totales de estructuras ($L_x = 10000$ Å y 5000 Å). En el caso de (d), la curva de $L_x = 10000$ Å sigue siendo la misma que en (c). Sin embargo, se escala la curva que corresponde a $L_x = 5000$ Å [61].

donde $\beta = 3$ es el factor de escala.

Fig.3.9(c) muestra el factor de Fano de la generación (g_7) para dos tipos de longitudes totales de estructuras. Basándonos en el mismo método descrito anteriormente, conectamos dos tipos de diferentes longitudes totales (*i.e.*: $L_x = 10000$ y 5000 Å) de la estructura. Las figuras 3.9(c) y 3.9(d) tienen los mismos parámetros. Sin embargo, en este caso, la curva que corresponde a $L_x = 5000$ Å se escala con una transformación matemática definida por:

$F_{g_7, L_x}(E_F^*) = 3F_{g_7, L_x/2}(E_F^*/2)$, donde la energía de Fermi se ha dividido por 2. Por lo tanto,

el número 3 en la transformación matemática representa el factor de escala que relaciona dos longitudes totales de la estructura. Como se encontró previamente, el comportamiento auto-similar aparece entre dos longitudes totales de la estructura. En particular, la regla de escala propuesta aquí no puede funcionar sin dividir la energía de Fermi por 2. Esto es diferente de la altura de escala anterior de la barrera principal. Adicionalmente, hemos propuesto una expresión general como regla de escala, dada como:

$$F_{g_i, L_x}(E_F^*) \approx \beta^p F_{g_i, L_x/2}(E_F^*/2), \quad (3.8)$$

donde β es el factor de escala que es igual a 3, i es el número de generación y p es la diferencia entre generaciones.

Es importante señalar, que el transporte electrónico en estructura auto-similar basada en una monocapa de grafeno ha sido estudiado por D. Díaz-Guerrero et al. [21] y R. Rodríguez-González et al. [23]. Encontraron reglas de escala en el coeficiente de transmisión [21] y la conductancia [23] en su estructura, utilizando barreras de altura escaladas en $1/3$. Por el contrario, informamos nuevas reglas de escala del factor Fano en una estructura auto-similar, donde la altura de la barrera se escala por una proporción áurea. Otro punto a destacar, según estudios previos en este tipo de estructuras, el comportamiento auto-similar en la estructura en estudio (*i.e.*: SSP sobre grafeno) depende de la geometría de las barreras, altura (V_0) y ancho (L_x). En este sentido, para obtener reglas de escalamiento y de acuerdo con otros trabajos de investigación [12, 22, 23], es necesario tener tanto una estructura auto-similar como electrones relativistas de Dirac [24]. Finalmente, la auto-similitud puede reflejarse en las curvas de conductancia y factor de Fano, pero es necesario demostrar esto encontrando un factor de escala.

Fig. 3.10 muestra el factor de Fano de las dos generaciones (g_7, g_8) en función de la energía de Fermi para el SEP en la estructura del grafeno. Las figuras 3.10 (a), 3.10 (b) y 3.10 (c) representan el factor de Fano con los siguientes parámetros ($V_0 = 0.2$ eV, $L_x=10000$ Å), ($V_0=0.1$ eV, $L_x=10000$ Å), y ($V_0=0.2$ eV, $L_x=5000$ Å). En este sentido, investigamos el comportamiento auto-similar en este tipo de estructura como se hizo anteriormente y utilizando los mismos parámetros que antes. Sin embargo, se aplicaron varias transformaciones matemáticas a esta estructura, por ejemplo, (g_7, g_8). Para este caso, no logramos conectar las curvas del factor Fano porque no manifiesta el comportamiento auto-similar.

En (Fig. 3.10 (a)), el factor Fano tiene un máximo cercano a $1/3$ para la generación g_7 . Este valor generalmente se reporta en la monocapa de grafeno. El valor parece cambiar

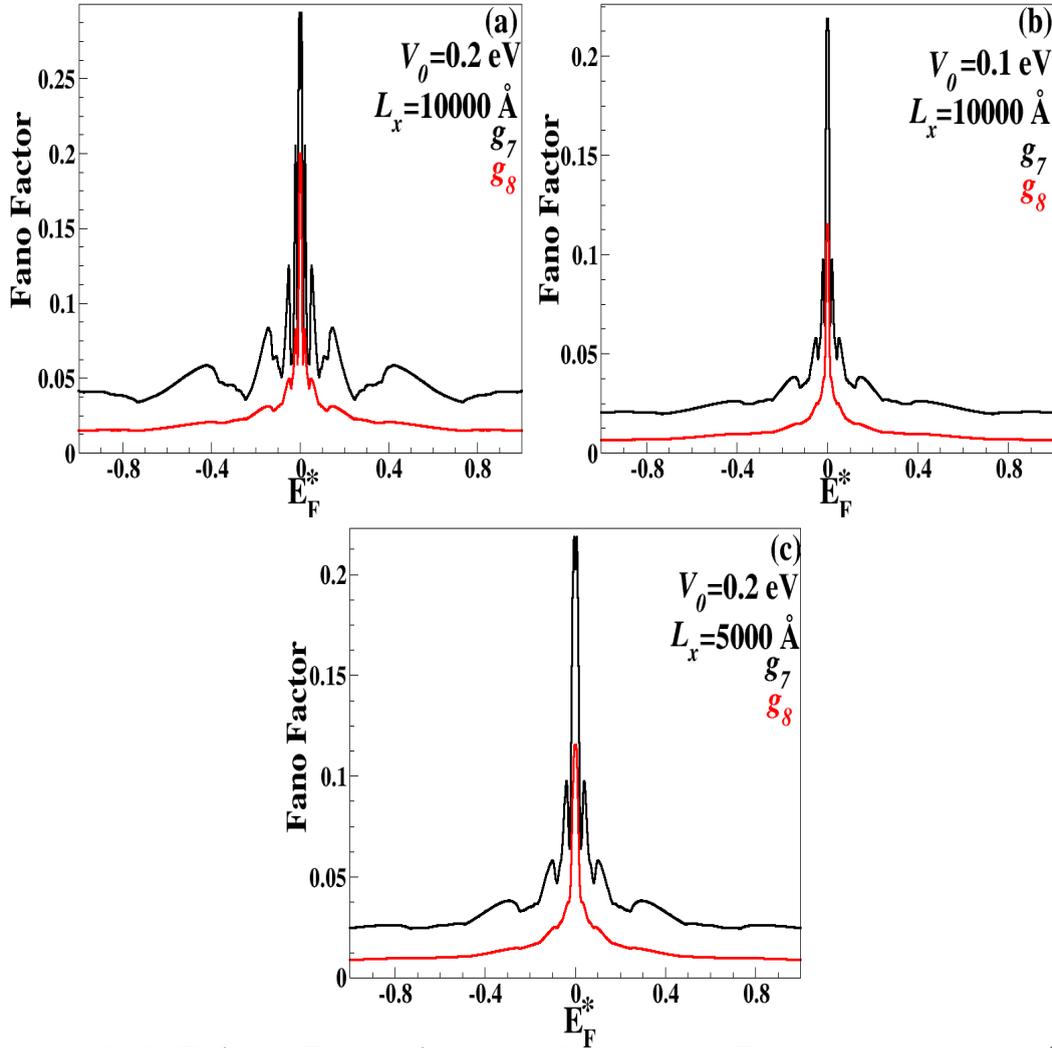


FIGURA 3.10: El factor Fano en función de la energía de Fermi por generaciones (g_7 , g_8) con diferentes alturas de la barrera principal y longitudes de la estructura total en la estructura de grafeno auto-similar electrostática. (a) Factor Fano para altura de la barrera principal $V_0 = 0.2$ eV y longitud total de la estructura $L_x = 10000$ Å. (b) Factor de Fano para $V_0 = 0.1$ eV y $L_x = 10000$ Å. (c) Factor de Fano para $V_0 = 0.2$ eV y para $L_x = 5000$ Å [61].

cuando aumenta el número de generaciones, como se muestra en la Fig. 3.10 (a).

Fig. 3.10 (b) representa el factor Fano de (g_7 y g_8) con los siguientes parámetros $V_0=0.1$ eV y $L_x=10000$ Å. Al cambiar la altura de la barrera principal, el máximo del factor Fano también cambia y es aproximadamente igual a $1/2$. De lo contrario hemos cambiado la longitud total $L_x=5000$ Å de la estructura, los resultados se presentan en la Fig. 3.10 (c). En consecuencia, el factor Fano parece tener el mismo valor máximo que los resultados antes mencionados.

Finalmente, en este trabajo hemos analizado el máximo del factor Fano en términos de los siguientes parámetros: altura de la barrera principal, longitudes totales de la estructura

y valor máximo del factor Fano. Concluimos que el cambio de generación, la altura de la barrera o el ancho de la estructura afectan al máximo el factor Fano.

3.3. Propiedades de auto-similaridad en Termoelectricidad

En este trabajo hemos estudiado el transporte y los efectos termoeléctricos en una estructura auto-similar, basada en grafeno. Consideramos el hamiltoniano de Dirac para describir el comportamiento de los electrones de Fermi a través de la superred de grafeno. Los sustratos, como SiO_2 y SiC , se introducen como una serie de barreras-pozos en grafeno. Se utilizó el formalismo de matriz de transferencia, así como Landauer-Büttiker y la fórmula de Cutler-Mott para calcular, por cada generación, primero el coeficiente de transmisión, luego la conductancia, el coeficiente de Seebeck y finalmente el factor de potencia. Encontramos patrones auto-similares en el transporte y en las propiedades termoeléctricas. Además, obtuvimos las reglas de escala que describen la invariancia entre generaciones del sistema. Se ha implementado estas reglas de escala como expresiones matemáticas generales. También llevamos a cabo una demostración analítica de la regla de escala en el coeficiente de Seebeck, que tampoco se ha realizado, además se ha realizado un análisis comparativo entre reglas de escala numéricas y analíticas.

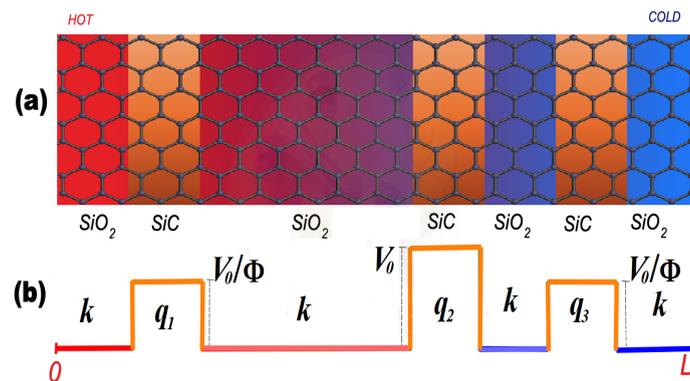


FIGURA 3.11: Representación gráfica de la segunda generación (g_2) de una estructura multibarrera auto-similar en grafeno. (a) La hoja de grafeno se deposita sobre sustratos alternos, como SiO_2 (losas rojas a azules) y SiC (losas naranjas), correspondientes a pozos y barreras, respectivamente. El rojo y el azul indican el lado frío y caliente de la estructura termoeléctrica. (b) El perfil potencial de la estructura, el azul-rojo y el naranja indican las regiones del pozo y la barrera, respectivamente. k y q_j son los vectores de onda en los pozos y barreras, respectivamente [62].

En primer lugar, comenzamos a investigar la regla de escala del coeficiente de transmisión en función del ángulo para una energía fija. En las Figuras 3.13 (a), 3.13 (b),

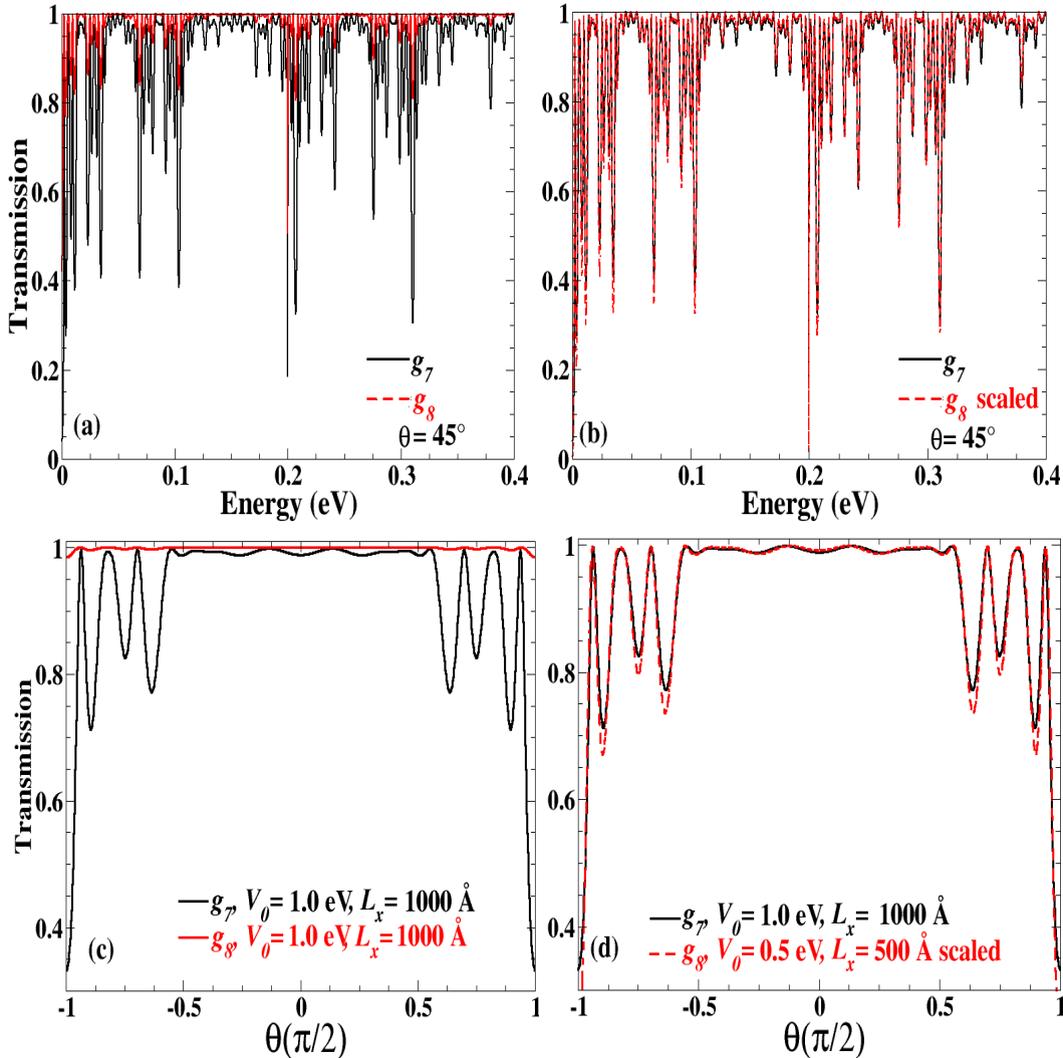


FIGURA 3.12: Escalado de transmisión en función de la energía y en función del ángulo de incidencia. (a) Patrones de transmisión en función de la energía en un ángulo fijo del electrón incidente, $\theta = 45^\circ$. (b) es lo mismo que (a), pero en este caso se escala la curva roja correspondiente a g_8 . (c) Patrones de transmisión en función del ángulo de incidencia con una energía de electrones fija $E_x = 0.15$ eV. (d) igual que (c) pero en este caso se escala la curva roja correspondiente a N_8 . En (a) y (b), la altura de la barrera principal es $V_0 = 0.2$ eV y la longitud del sistema es $L_x = 10000$ Å [62].

presentamos las propiedades de escala de la transmisión en un ángulo de incidencia fijo, $\theta = 45^\circ$. La Figura 3.13 (a), muestra el coeficiente de transmisión en función de la energía para las generaciones g_7 , g_8 con una altura específica de la barrera principal $V_0 = 0.2$ eV y longitud total del sistema $L_x = 10000$ Å. La Fig. 3.13 (b), presenta la transmisión escalada g_8 , con parámetros diferentes a los de la curva g_7 , como podemos ver, ambas curvas, g_7 y g_8 se superponen, esta superposición se produce cuando aplicamos una transformación matemática. La transformación viene como: $T_{g_7}(\theta, E_x) \approx [T_{g_8}(\theta, E_x)]^6$. Expresado de

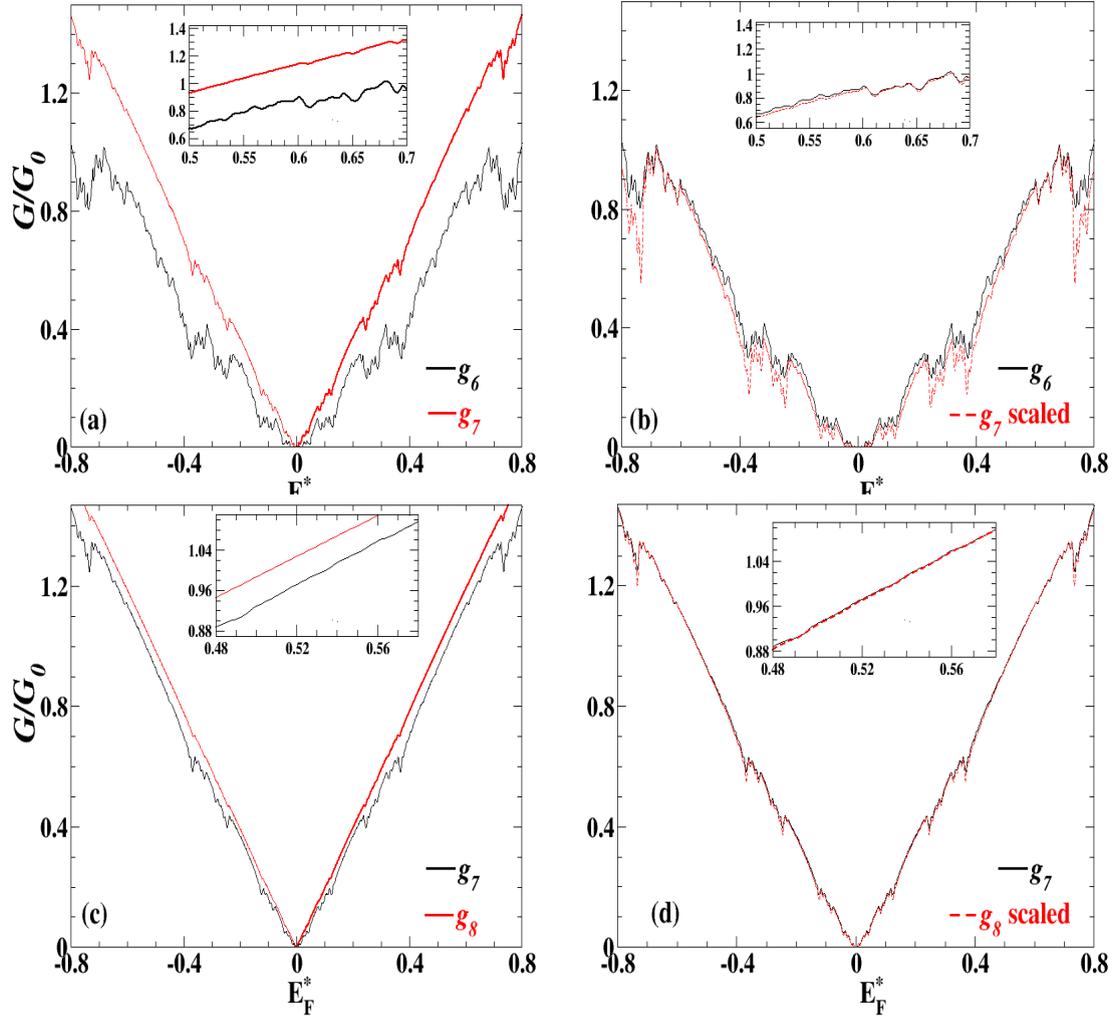


FIGURA 3.13: Escalando la conductancia G entre las generaciones g_6 , g_7 , g_8 en función de la energía de Fermi. (a), (c) Respectivamente, curvas de conductancia entre pares de generaciones (g_6, g_7) y (g_7, g_8). (b), (d) Las mismas curvas, pero en este caso, la generación g_7 (curva roja) y g_8 (curva roja) están escaladas. En la figura insertada, apreciamos la superposición de patrones en un intervalo reducido de energía de Fermi. La altura de la barrera principal $V_0 = 0.2$ eV, y la longitud total del sistema es $L_x = 10000$ Å [62].

otro modo, las curvas del coeficiente de transmisión están relacionadas por una potencia determinada, pero se diferencian en su generación correspondiente. La regla de escala es una marca de auto-similitud en las propiedades de transmisión como en la transmisión con incidencia normal [12, 21, 22]. En este tipo de sistema, las propiedades de auto-similaridad surgen prácticamente a partir de la generación g_7 , porque el sistema comienza a exhibir un comportamiento casi auto-similaridad a partir de g_6 . Esta regla de escala es válida para cada dos generaciones, lo que nos lleva a generalizarla:

$$T_{g_i}(\theta, E_x) \approx [T_{g_{i+p}}(\theta, E_x)]^{\eta^p}, \quad (3.9)$$

donde g_i es el número de generación, η es el factor de escala cuyo valor es igual a 6, y p es la diferencia entre generaciones. En las Figs. 3.13 (c), 3.13 (d), presentamos las propiedades de escalamiento de coeficiente de transmisión en función del ángulo de incidencia del electrón de Dirac. La Fig. 3.13 (c) presenta la transmisión en función del ángulo de incidencia para las generaciones g_7, g_8 con una altura específica de la barrera principal $V_0 = 1.0$ eV y longitud total del sistema $L_x = 1000$ Å. La Fig. 3.13 (d), presenta las propiedades de transmisión con los parámetros mencionados, sin embargo, la generación g_8 está escalada por $V_0 = 0.5$ eV y $L_x = 500$ Å, además como una transformación matemática: $T_{(g_7, 1.0, 1000)}(\theta, E_x) \approx [T_{(g_8, 0.5, 500)}(\theta, E_x)]^5$. De acuerdo con la Fig. 3.13 (d) es claro que la transmisión de ambas generaciones g_7 y g_8 escaladas, se superponen, estas propiedades de escalado se pueden expresar como una regla de escalado de forma generalizada:

$$T_{(g_i, V_0, L_x)}(\theta, E_x) \approx [T_{(g_{i+p}, V_0/\beta, L_x/\gamma)}(\theta, E_x)]^{\eta^p (\gamma\beta)^2}, \quad (3.10)$$

donde g_i es el número de generación, η es el factor de escala cuyo valor es igual a 5, p es la diferencia entre generaciones, y γ y β son factores vienen en múltiplos de dos.

De hecho, esta expresión analítica es una aproximación (regla de combinación) de las reglas de escala individuales, tal como se han estudiado, por ejemplo, entre generaciones, entre dos alturas de la barrera principal y la longitud de todo el sistema. Para comparar la correspondencia entre curvas no escaladas y escaladas, calculamos la desviación cuadrática media (RMSD) para las Figs. 3.13 (b), 3.13 (d). Los resultados se presentan en la tabla 3.1.

TABLA 3.1: La desviación cuadrática media de la escala de transmisión [62].

	RMSD						
η	4	5	6	7	8	9	
Fig. 3.13(b)	3.98×10^{-2}	2.79×10^{-2}	2.18×10^{-2}	2.39×10^{-2}	3.15×10^{-2}	4.10×10^{-2}	
Fig. 3.13(d)	3.13×10^{-2}	1.75×10^{-2}	2.15×10^{-2}	3.51×10^{-2}	4.97×10^{-2}	6.39×10^{-2}	

El factor de escala η , con un RMSD más bajo, brinda la mejor aproximación entre la curva escalada y no escalada. Por lo tanto, está claro que el mejor valor del factor de escala η es 6 para la regla de escala (Ec. (3.9)). El mejor factor de escala η es 5 para la regla de escala (Ec. (3.10)).

En segundo lugar, la transmisión permite calcular directamente la conductancia sumando todos los canales de transmisión, ver (Ec. (2.25)). Por lo tanto, es posible explorar la auto-similaridad y la escalabilidad de los patrones de conductancia. En la Figura. 3.14, mostramos los patrones de conductancia para las generaciones g_6, g_7 y g_8 en función de

la energía de Fermi. En particular, hemos considerado pares de generaciones (g_6, g_7) y (g_7, g_8) , (Figs. 3.14(a), 3.14(c)), respectivamente. A primera vista, notamos que las dos curvas divergen cuando aumenta la energía de Fermi. Sin embargo, con una transformación matemática apropiada, podemos conectar los pares de curvas de conductancia (g_6, g_7) y (g_7, g_8) , (ver Figs. 3.14(b), 3.14(d)). La transformación matemática viene como: $\mathbb{G}_{g_7}(E_F^*) \approx [\mathbb{G}_{g_8}(E_F^*)]^6 / (2E_F^*)^5$, donde el subíndice es el número de generación. Es interesante notar que los factores 6 y $(2E_F^*)^5$ son los factores de escala que relacionan las generaciones. En otras palabras, esta transformación muestra que existe un comportamiento auto-similar. También podemos generalizar esta transformación como:

$$\mathbb{G}_{g_i}(E_F^*) \approx \frac{[\mathbb{G}_{g_{i+p}}(E_F^*)]^{\eta^p}}{(2E_F^*)^{\eta^p - 1}}, \quad (3.11)$$

donde g_i es el número de generación, η es el factor de escala cuyo valor es igual a 6 y p es la diferencia entre generaciones.

También hemos calculado el RMSD para la escala de conductancia Fig. 3.14(d), que muestra los resultados en la tabla 3.2. Con base en los resultados de RMSD, podemos

TABLA 3.2: La desviación cuadrática media de la escala de conductancia [62].

		RMSD				
η	4	5	6	7	8	9
Fig. 3.14(d)	2.95×10^{-2}	1.28×10^{-2}	8.10×10^{-3}	2.32×10^{-2}	3.94×10^{-2}	5.55×10^{-2}

notar que el mejor valor del factor de escala η , en el caso de la regla de escala de conductancia (Ec. (3.11)) es 6. Aún más interesante, las propiedades de escala en el caso de la conductancia aparecen aún más entre las diferentes alturas de la barrera principal y las longitudes totales del sistema.

En las Figuras. 3.15 (a), 3.15 (c), reportamos el coeficiente de Seebeck como una función de la energía de Fermi, para las generaciones g_6, g_7 y g_8 . Además, como en el caso de la conductancia y el coeficiente de transmisión, investigamos la regla de escala de Seebeck entre generaciones. En las Figuras. 3.15(b), 3.15(d), esperamos que suceda lo mismo entre (g_6, g_7) y (g_7, g_8) . En particular, exploramos la siguiente regla de escala: $S_{g_6} \approx 6S_{g_7} - 5S_0/E_F^*$, donde tanto 6 como $5S_0/E_F^*$ representan los factores de escala. Como podemos ver, esta regla de escala funciona bastante bien. Es importante enfatizar que la regla de escala para el coeficiente de Seebeck es notablemente diferente de las encontradas para la transmisión y la conductancia. Como en el caso de la transmisión y la conductancia, proponemos una expresión general que conecta los patrones del coeficiente

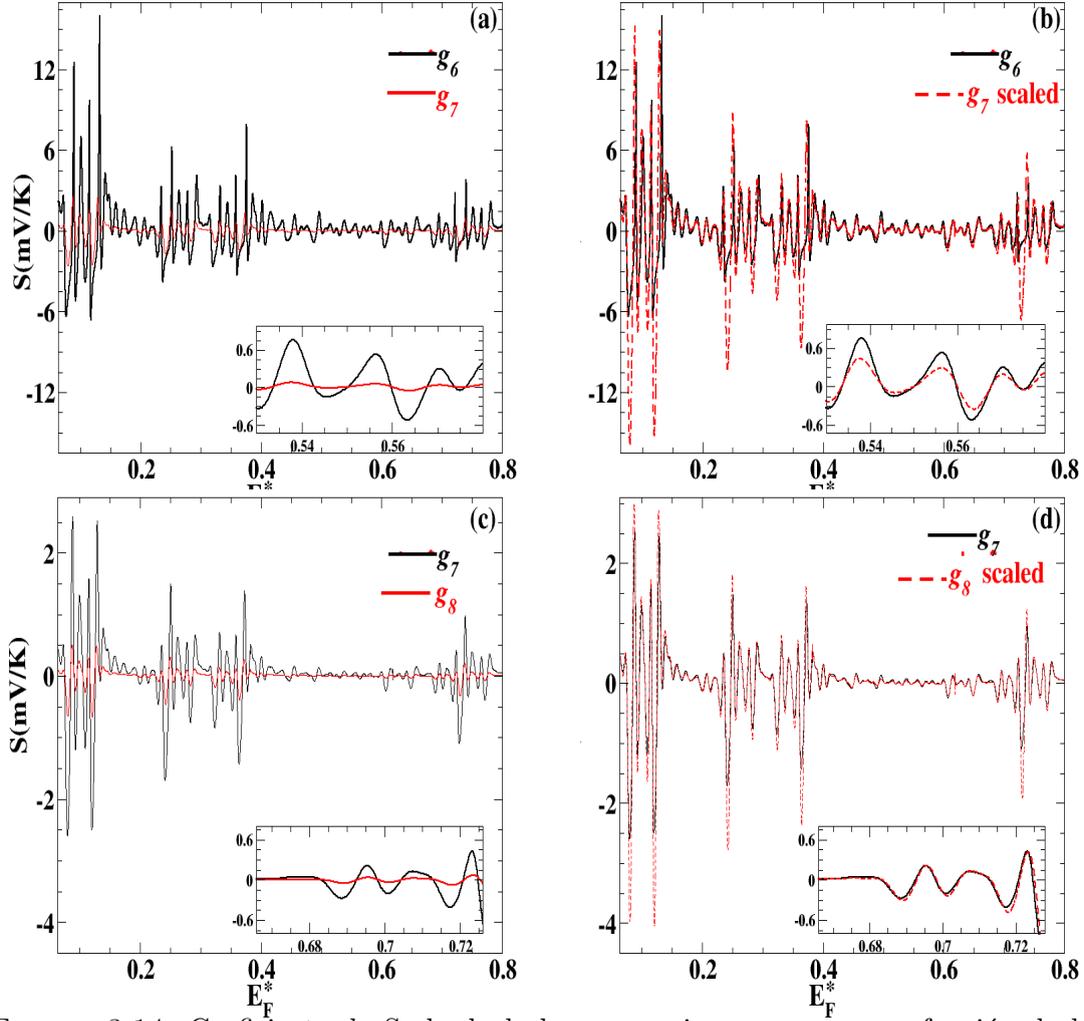


FIGURA 3.14: Coeficiente de Seebeck de las generaciones g_6, g_7, g_8 en función de la energía de Fermi. (a), (c) Representar respectivamente las curvas del coeficiente de Seebeck entre las generaciones (g_6, g_7) y (g_7, g_8). (b), (d) son las mismas curvas, pero en este caso, ambos pares de generaciones se modifican mediante una transformación de escala (ver texto). En la figura insertada, apreciamos la superposición de patrones en un intervalo reducido de energía de Fermi. En este caso, la altura de la barrera principal es $V_0 = 0.2$ eV, y la longitud total del sistema es $L_x = 10000$ Å [62].

de Seebeck entre generaciones:

$$S_{g_i}(E_F^*) \approx \eta^p S_{g_{i+p}}(E_F^*) - \frac{(\eta^p - 1)S_0}{E_F^*}, \quad (3.12)$$

donde p es la diferencia entre generaciones, η es el factor de escala cuyo valor es igual a 6.

El RMSD del coeficiente de escala de Seebeck se calcula y se muestra en la tabla 3.3, de acuerdo con el RMSD, el factor de escala η con un RMSD más bajo es de 3, por lo que en una regla de escala de Seebeck (Ec (3.12)) tiene que ser 3 no 6 que presenta la mejor escala en este caso.

TABLA 3.3: La desviación cuadrática media de la escala del coeficiente Seebeck [62].

RMSD									
η	3	4	5	6	7	8	9		
Fig. 3.15(d)	1.95×10^{-3}	2.02×10^{-3}	2.32×10^{-3}	2.78×10^{-3}	3.34×10^{-3}	3.95×10^{-3}	4.60×10^{-3}		

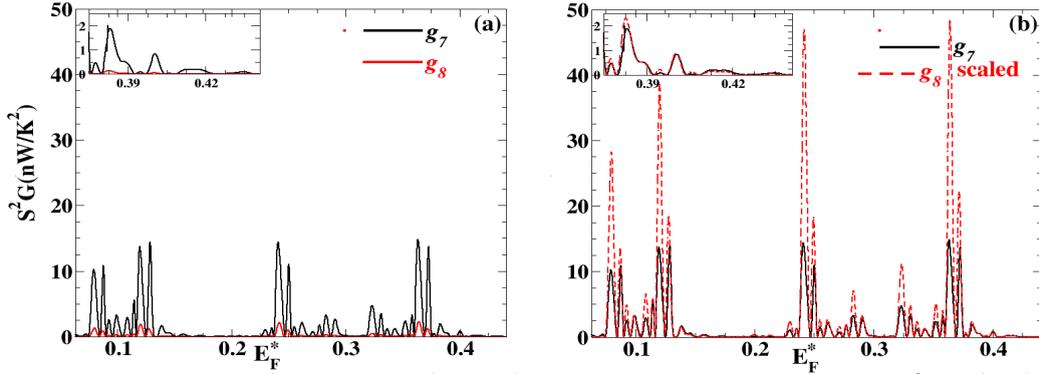


FIGURA 3.15: Factor de potencia de escala entre generaciones g_7, g_8 en función de la energía de Fermi. (a) Factor de potencia entre generaciones (g_7, g_8). (b) Las mismas generaciones, pero en este caso, la generación g_8 se escala mediante la transformación de escala (Ec. (3.12)). En la figura insertada, apreciamos la superposición de patrones en un intervalo reducido de energía de Fermi. Por ejemplo, la altura de la barrera principal $V_0 = 0.2$ eV, y la longitud total del sistema es $L_x = 10000$ Å [62].

Ahora toca hablar de las condiciones para encontrar reglas de escala para el coeficiente de transmisión, la conductancia y el coeficiente de Seebeck en este tipo de sistemas, de acuerdo a nuestros resultados y a otras investigaciones, es importante tener un sistema auto-similar con los electrones de Dirac [21, 22]. En el caso de la conductancia y el coeficiente de Seebeck, las reglas de escala son diferentes en comparación con las del coeficiente de transmisión porque en este caso no se pueden encontrar sin escalar la energía, lo que también hace que sea muy difícil encontrar estas reglas. Otro aspecto que queremos discutir es la validez de las reglas de escala. En relación con este punto, es interesante señalar que nuestro sistema tiene límites. Por ejemplo, en generaciones bajas nuestro sistema no es realmente auto-similar, por lo que no esperamos que surjan reglas de escala en el coeficiente de transmisión y la conductancia, ni tampoco en el coeficiente de Seebeck. En generaciones altas, debemos tener cuidado, porque la longitud de nuestra estructura excederá la distancia carbono-carbono, por lo tanto, nuestro sistema estará fuera de sentido físico. Nuestro sistema también está limitado por el diseño físico que proponemos. Por ejemplo, la altura de la barrera principal no puede ser superior a 2 eV, de lo contrario estaremos fuera de la aproximación lineal en grafeno. En cuanto a los límites que hemos mencionado, podemos manejarlos ajustando los parámetros del sistema, particularmente la longitud de la estructura y la altura de la barrera principal,

para llegar a más generaciones con características auto-similares. Es importante tener en cuenta que las reglas de escala que se encuentran en el coeficiente de transmisión no pueden implementarse directamente en la conductancia y el coeficiente de Seebeck, debido a la suma sobre todos los canales de transmisión, lo que no permite realizar una demostración analítica de la auto-similitud. Sin embargo, hemos implementado con éxito la conductancia directamente en el coeficiente de Seebeck.

Ahora, presentamos aquí la demostración analítica de las propiedades auto-similares en el coeficiente de Seebeck. A partir de la expresión general analítica de la conductancia (ecuación (3.11)), tratamos de encontrar la regla de escala de Seebeck y luego la comparamos con los resultados numéricos. En primer lugar, escribimos la fórmula general del coeficiente de Seebeck:

$$S = S_0 \frac{\ln(\mathbb{G}(E^*))}{E^*} \Big|_{E^*=E_F^*} . \quad (3.13)$$

Luego formulamos esta ecuación para la generación N_7 :

$$S_{g_7} = S_0 \frac{\ln(\mathbb{G}_{g_7}(E^*))}{E^*} \Big|_{E^*=E_F^*} . \quad (3.14)$$

Reemplazando g_7 en términos de g_8 según la regla de escala de conductancia (Ec. (3.11)):

$$S_{g_7} = S_0 \frac{\ln\left(\frac{(\mathbb{G}_{g_8})^\eta}{(2E^*)^{\eta-1}}\right)}{E^*} \Big|_{E^*=E_F^*} . \quad (3.15)$$

Derivando esta ecuación se obtiene:

$$S_{g_7} = \eta S_0 \frac{\ln(\mathbb{G}_{g_8})}{E^*} - \frac{(\eta - 1)S_0}{E^*} \Big|_{E^*=E_F^*} , \quad (3.16)$$

o equivalente:

$$S_{g_7} = \eta S_8 - \frac{(\eta - 1)S_0}{E^*} \Big|_{E^*=E_F^*} . \quad (3.17)$$

Como podemos notar, las reglas de escalado numérico y analítico son prácticamente las mismas, compárese (Ecs. (3.12) y (3.17)). Sin embargo, el factor de escala se puede ajustar para dar una mejor escala. Por ejemplo, para el caso que hemos presentado, se puede utilizar un factor de escala 3 en lugar de 6, dando un mejor escalado, como se puede ver directamente en las curvas de la Fig. 3.15, así como en el RMSD para el mencionado η .

Después de encontrar analítica y numéricamente la regla de escala para el coeficiente de Seebeck, llevamos a cabo una búsqueda de las reglas de escala del factor de potencia usando el mismo método. Como hemos dicho en la metodología, el factor de potencia es el producto del cuadrado del coeficiente de Seebeck y la conductancia S^2G . En la Fig. 3.16 (a), mostramos el factor de potencia como una función de la energía de Fermi por generaciones (g_7, g_8). Como hemos dicho a lo largo del manuscrito, la derivación de las reglas de escala es, en general, complicada. Entonces, el factor de potencia no es la excepción. De hecho, es realmente desafiante, incluso numéricamente. Guiados por los resultados del coeficiente de Seebeck, intentaremos encontrar la regla de escala para el factor de potencia utilizando directamente las reglas de escala para la conductancia y el coeficiente de Seebeck, a saber:

$$S_{g_7}^2 G_{g_7}(E_F^*) \approx \left(6S_{g_8}(E_F^*) - \frac{5S_0}{E_F^*} \right)^2 \frac{[G_{g_8}(E_F^*)]^6 G_0}{(2E_F^*)^5}. \quad (3.18)$$

En la Fig. 3.16 (b), mostramos los resultados de escala para el factor de potencia. Como podemos notar, el escalado funciona razonablemente bien a pesar de la complejidad de la (Ec. 3.18). Esto nos da margen para pensar en una expresión general:

$$S_{g_i}^2 G_{g_i}(E_F^*) \approx \left(\eta^p S_{g_{i+p}}(E_F^*) - \frac{(\eta^p - 1)S_0}{E_F^*} \right)^2 \frac{[G_{g_{i+p}}(E_F^*)]^{\eta^p} G_0}{(2E_F^*)^{\eta^p - 1}}. \quad (3.19)$$

Desafortunadamente, en este caso, no podemos relacionar explícitamente los factores de potencia entre dos generaciones específicas. En relación con este punto, queremos comentar que la tarea de encontrar analíticamente las reglas de escala en el coeficiente de transmisión y la conductancia es realmente difícil. De hecho, el coeficiente de transmisión es el resultado de la matriz de transferencia, que es la multiplicación de varias matrices. Asimismo, la conductancia es la integral del coeficiente de transmisión en todos los canales de transmisión. Por eso es complicado encontrar una expresión analítica para los patrones auto-similares. Sorprendentemente, es posible hacerlo para el coeficiente de Seebeck reemplazando la expresión de escala de la conductancia directamente en la conocida fórmula de Cutler-Mott. De hecho, funciona bien y concuerda con la regla de escala que se obtiene numéricamente.

Finalmente, en lo que respecta al coeficiente de transmisión, la conductancia e incluso el factor de potencia, la búsqueda de reglas de auto-similitud sigue siendo un desafío y es una perspectiva de este trabajo. También vale la pena mencionar que en este tipo de estructuras la conductancia aumenta a medida que aumenta la generación (ver Fig. 3.15).

Esta es una tendencia general en las estructuras auto-similares. En realidad, la tendencia mencionada está directamente relacionada con la fragmentación de la estructura, específicamente, el ancho y la altura de las barreras. Esta fragmentación de las barreras favorece la propagación de estados, dando lugar a una mejora general en la conductancia y el coeficiente de Seebeck [24]. Para terminar es importante remarcar que el sistema auto-similar que presentamos en este trabajo podría ser un desafío para los experimentalistas. El principal obstáculo es que necesitábamos un sustrato que interactúe de manera diferente con la hoja de grafeno [22, 24]. Afortunadamente, otros efectos externos, campos eléctricos y magnéticos, que son una realidad desde el punto de vista experimental en materiales 2D, pueden ser una opción para generar estructuras auto-similares.

3.4. Estados casi-localizados en grafeno

En este trabajo estudiamos los estados casi-localizados (QBS) en una barrera y dos barreras electrostáticas en grafeno, se resuelve la ecuación de Dirac y se utiliza el formalismo de la matriz de transferencia, así como la continuidad de la función de onda, para calcular el coeficiente de transmisión y determinar las energías de resonancia. Para cada energía de resonancia, se calcula la función de probabilidad (PDF) para trazar los QBS para una o dos barreras (ver Figs. 3.17, 3.16). Los resultados indican que los electrones de Dirac quedan atrapados en el espacio por encima de la barrera y son sensibles al ancho y la altura de la barrera. De manera similar, investigamos los QBS en el caso de dos barreras rectangulares con la misma altura y anchura. Se ha encontrado que el ancho del pozo entre las dos barreras podría influir en el control de los QBS.

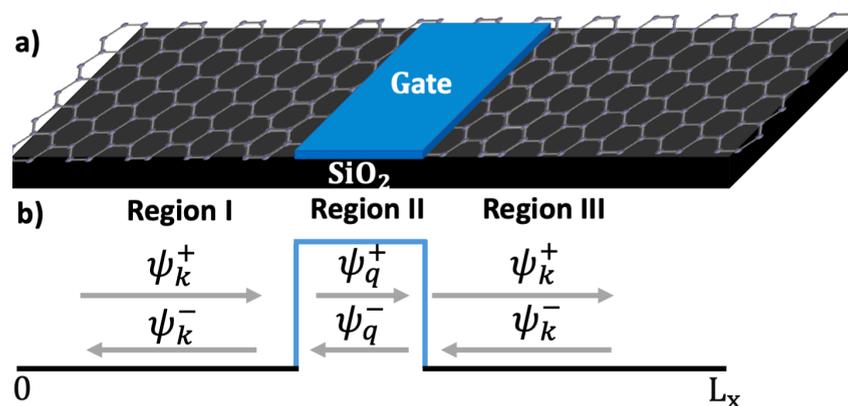


FIGURA 3.16: a) Ilustración esquemática de una barrera electrostática rectangular en una monocapa de grafeno. (b) El perfil de potencial indica las partículas incidentes y reflejadas en cada región.

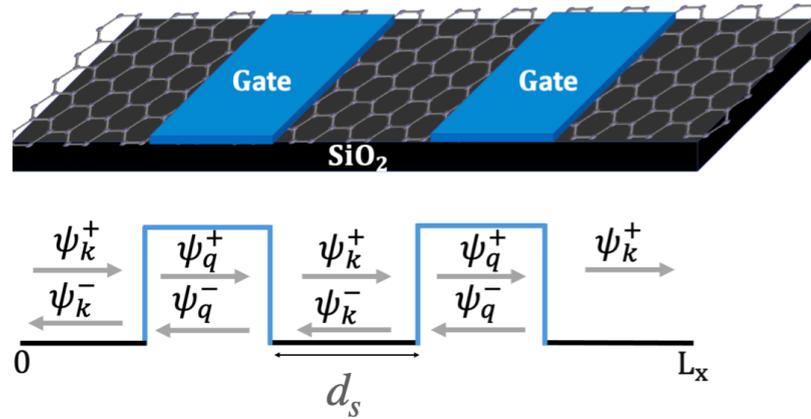


FIGURA 3.17: Ilustración esquemática del caso de dos barreras electrostáticas rectangulares en una monocapa de grafeno. d_s es el ancho de pozo.

Primero exploramos la existencia de los QBS en una barrera. En primer lugar, calculamos la función de densidad de probabilidad para cada energía de resonancia para obtener los QBS, que se determina utilizando la transmitancia. Sin embargo, la probabilidad de transmisión en función de la energía de Fermi se muestra en la Fig.3.17. Los parámetros de la estructura utilizada son la altura ($V_0 = 0.2$ eV), la longitud de la barrera es ($W_B = 150$ Å), y el ángulo de incidencia del electrón de Dirac es $\theta = 15^\circ$. Estos parámetros fueron elegidos, entre otros, para obtener las energías de QBS en grafeno en el régimen de aproximación lineal. A continuación, examinamos los QBS a diferentes energías de resonancia obtenidas de la curva de transmisión para ($T = 1$).

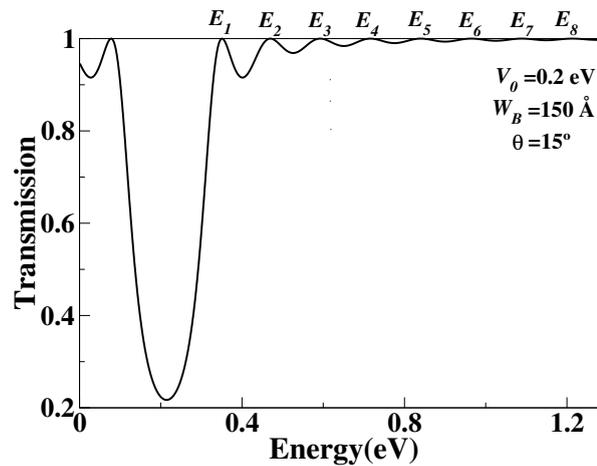


FIGURA 3.18: La probabilidad de transmisión en función de la energía de Fermi. (E_i) son las energías de resonancia donde $i = 1, 2, \dots, N = 8$. La altura de la barrera es $V_0 = 0.2$ eV, la barrera es de longitud $L_x = 150$ Å, y el ángulo de incidencia del electrón es $\theta = 15^\circ$.

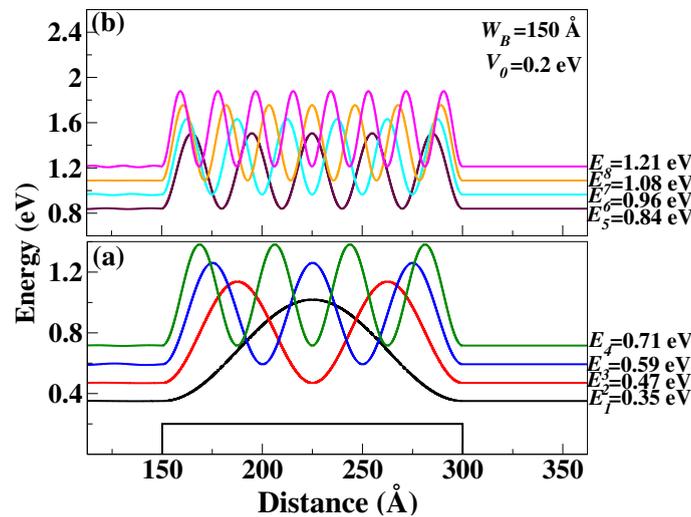


FIGURA 3.19: La Función de Densidad de Probabilidad (PDF) en función de la distancia x . (E_i), donde $i = 1, 2, 3, 4, \dots, N = 8$ son los niveles de energía de QBS por encima de la barrera, respectivamente. Las energías de resonancia del electrón de Dirac se eligen de modo que el coeficiente de transmisión sea $T = 1$. La altura de la barrera es $V_0 = 0.2$ eV, la longitud de la barrera es $L_x = 150$ Å, el ángulo de incidencia del electrón es $\theta = 15^\circ$. PDF se normaliza a la longitud de la estructura.

La figura 3.18 muestra los estados de resonancia y la probabilidad de existencia del QBS, para diferentes energías de resonancia. La Fig. 3.18 (a), presenta el caso del ancho de barrera $W_B = 150$ Å. De acuerdo con la Figura, la primera energía de resonancia E_1 corresponde al primer QBS, y se manifestó por encima de la barrera de energía. En la siguiente energía resonante E_2 , se observó otra característica del QBS, mientras que en la energía alta E_3 presentó más QBS. El comportamiento del QBS cambia de un nivel de energía a otro, en cuanto al número de nodos, que aumenta con la energía. En otras palabras, los estados cuasi-localizados aparecen en serie por encima de la barrera. Sus distribuciones espaciales tienen un máximo de uno, dos, tres, etc., como en el caso de los estados ligados en los semiconductores convencionales [57].

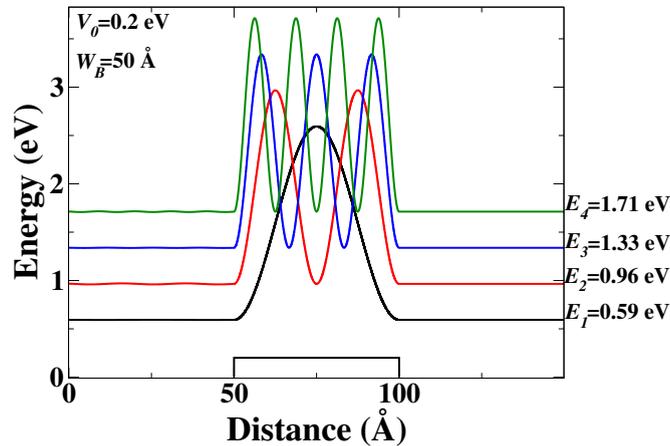


FIGURA 3.20: La función de densidad de probabilidad (PDF) como una función de la distancia x . E_1 , E_2 , E_3 y E_4 corresponden a las energías de resonancia de QBS por encima de la barrera, respectivamente. Las energías del electrón de Dirac se eligen de modo que el coeficiente de transmisión $T = 1$. La longitud de la barrera es $L_x = 50 \text{ \AA}$, y el ángulo de incidencia del electrón es $\theta = 15^\circ$. PDF se normaliza a la longitud de la estructura.

De lo contrario, para investigar la evolución de diferentes QBS, se exploraron otras energías de resonancia y los resultados se muestran en la Fig. 3.18 (b). A altos niveles de energía, los QBS muestran las mismas características y el número de máximos y mínimos aumenta cuando la energía de resonancia también aumenta, como se encontró previamente en la Fig. 3.18 (a).

Se exploró el efecto del ancho de la barrera en QBS. El QBS del sistema para un ancho de barrera $W_B = 50 \text{ \AA}$ se determinó usando los mismos parámetros que antes. La Fig. 3.19 representa el QBS en función de la distancia de la barrera para $W_B = 50 \text{ \AA}$ y $V_0 = 0.2 \text{ eV}$. Los electrones están casi localizados en un nivel de energía por encima de la barrera. Las energías QBSs del ancho de barrera $W_B = 50 \text{ \AA}$ son mayores que el ancho de barrera $W_B = 150 \text{ \AA}$. Las energías de los QBS disminuyen cuando aumenta el ancho de la barrera, y los resultados concuerdan bien con la expresión de la relación de dispersión (Ec. 5). Curiosamente, el QBS ubicado en la barrera está coincido, por el ancho de la barrera W_B y la barrera de energía V_0 . El efecto del ancho de la barrera en el QBS ha llevado a la exploración de diferentes anchos de barrera.

En esta parte, se han explorado varios anchos de barrera. Los resultados muestran desviación de las energías de resonancia, ya que sus valores cambian. Del mismo modo,

exploramos diferentes alturas de barrera, los niveles de energía no muestran cambios significativos, resulta que la altura de la barrera no afecta tanto a los estados cuasi-localizados.

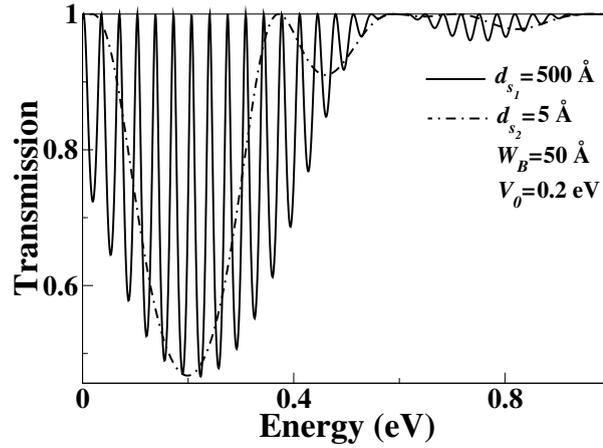


FIGURA 3.21: La probabilidad de transmisión en función de la energía de Fermi. El coeficiente de transmisión se calcula para dos anchos de pozo, por ejemplo, d_{s1} , d_{s2} . El ángulo de incidencia del electrón es $\theta = 15^\circ$.

Además, utilizando diferentes ángulos de incidencia, los niveles de energía pueden cambiar gradualmente, aumentando el ángulo de incidencia, lo que indica que el ángulo de incidencia podría impactar en los QBS.

Ahora, investigamos cómo diferencia de niveles de energía de los estados cuasi-localizados (ΔE) se ve afectada por W_B y V_0 . Se observa que cuando cambia el ancho de la barrera, la ΔE no refleja ninguna respuesta, sin embargo, cuando cambia la altura de la barrera, se observa que ΔE está involucrada con un aumento en la altura de la barrera, y ΔE aumenta en consecuencia. Además, se ha estudiado el efecto de varios ángulos de incidencia, se observa que no hay efecto en ΔE cuando cambia el ángulo de incidencia, por lo tanto, no existe dependencia provocada por el cambio de este parámetro. En base empírica, hemos encontrado una fórmula aproximada para la ΔE que depende del ancho, como se expresa en la siguiente expresión:

$$\tilde{\Delta}_s = (W_B - 150)(W_B - 300) * 1.48 \cdot 10^{-5} - (W_B - 50)(W_B - 300) * 1.6 \cdot 10^{-5} + (W_B - 50)(W_B - 150) * 1.6 \cdot 10^{-6}, \quad (3.20)$$

donde W_B es la anchura de la barrera en Å, y $\tilde{\Delta}_s$ es la diferencia de niveles de energías en eV. Es importante notar que el comportamiento de los QBS en una barrera es asombroso, primero todos los estados están ubicados físicamente dentro de la barrera, luego la

probabilidad de encontrarlos en el espacio está en la zona de la barrera. Además, la diferencia entre dos energías de niveles sucesivos $\Delta E = E_{i+1} - E_i = 0.12$ eV es prácticamente constante.

En este artículo, reportamos que se realizó otro estudio para comprender el efecto generado por la doble barrera (DB) y el ancho del pozo d_s . El parámetro de distancia entre dos barreras ha sido ampliamente investigado previamente para varios sistemas. La figura 3.21 muestra la probabilidad de transmisión en función de la energía de doble barreras. La primera con un ancho de pozo $d_{s_1} = 500$ Å (línea continua) mientras que la segunda (línea discontinua) con un ancho de pozo $d_{s_2} = 5$ Å. Encontramos que la probabilidad de transmisión del primer (d_{s_1}) presenta un alto número de picos de resonancia, y se observa una curva de transmisión suave para el otro caso (d_{s_2}). Por lo tanto, las energías de resonancia se ven significativamente afectadas por la distancia del pozo (d_s), como se muestra en la Fig. 3.21, lo que tiene como resultado un efecto significativo en el QBS.

La figura 3.21 resume las energías de los QBS en función del ancho del pozo entre dos barreras. El primer caso con un ancho de pozo igual a $d_s = 5$ Å y el segundo es igual a $d_s = 500$ Å. Sin embargo, un detalle importante a tener en cuenta aquí es que el ancho del pozo tiene un efecto sustancial en los QBS y sus correspondientes energías de resonancia. De acuerdo con la figura, se puede notar que a medida que aumenta d_s , los niveles de energía disminuyen y, en consecuencia, los estados cuasi-localizados se pueden ajustar en este caso. Otro dato a agregar es cómo la forma del ángulo de incidencia afecta los niveles de energías. Con este fin, se han investigado varios ángulos de incidencia para el DB con ancho de pozo ($d_s = 5$ Å). Los niveles de energía exhiben una pequeña dependencia del ángulo de incidencia, y ΔE permanece constante. El mismo comportamiento se puede comentar en el caso de ($d_s = 500$ Å) distancia al pozo. Finalmente, los niveles de energía y ΔE no reflejan ninguna dependencia del ángulo de incidencia.

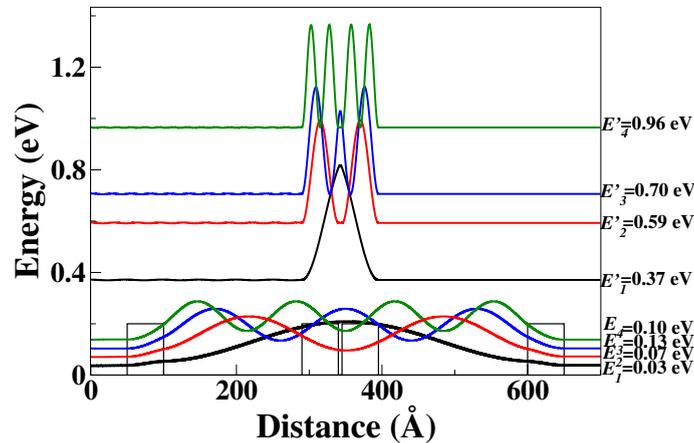


FIGURA 3.22: La función de densidad de probabilidad (PDF) es una función de la distancia x . E_1, E_2, E_3, E_4 son las energías de resonancia correspondientes al QBS para un caso de $d_{s_1} = 500 \text{ \AA}$. E'_1, E'_2, E'_3, E'_4 son PDF correspondientes al caso de $d_{s_2} = 5 \text{ \AA}$. La longitud de la barrera es $L_x = 150 \text{ \AA}$, el ángulo de incidencia del electrón es $\theta = 15^\circ$.

La Figura 3.22 muestra la resonancia de energía en función del ancho del pozo entre el DB (d_s). Esta gráfica confirma nuestros resultados anteriores encontrados en la Figura 3.21, como se indicó anteriormente, los niveles de energía disminuyen a medida que aumenta el ancho del pozo d_s . Para valores (d_s) cercanos a cero, los QBS en las barreras dobles exhiben una característica similar a una barrera. Otra característica importante es que a ciertas energías, los estados se han mantenido para valores específicos de d_s . Por ejemplo, en el caso de la energía $E = 0.59 \text{ eV}$, el QBS se ubica en el tercer estado de la sola barrera con el ancho ($W_B = 150 \text{ \AA}$) (ver figura 3.19). Para el caso de barrera con ancho $W_B = 50 \text{ \AA}$, la posición de este valor de energía se ve afectada y regresa a su estado fundamental (ver Fig. 3.20). Finalmente, es posible que algunos estados se mantengan en el caso de dola barrera y también coexistan en el caso de doble barreras.

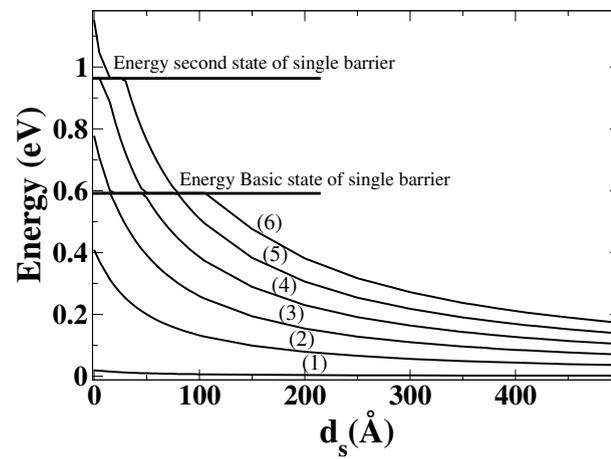


FIGURA 3.23: Energías de QBS en función de la distancia del pozo d_s entre dos barreras. Las curvas (1) a (6) indican respectivamente la energía de los QBS.

Conclusiones

Se ha investigado el comportamiento auto-similar en transporte cuántico y los efectos termoeléctricos utilizando estructuras multi-barreras auto-similares en una monocapa de grafeno. Estas estructuras se construyen a partir de varias generaciones, cada generación tiene número de barreras y pozos diferentes. El comportamiento auto-similar se demuestra mediante reglas de escalamiento que conectan diferentes generaciones, alturas de la barrera principal, y longitudes totales de la estructura de potenciales.

Se ha encontrado que el comportamiento auto-similar se manifiesta en el coeficiente de transmisión, el factor de Fano, la conductancia, el coeficiente de seebeck y factor de potencia.

Uno de los factores que hemos usado para escalar la altura de las barreras es la proporción áurea, de hecho es uno de los pocos que confiere nuevas reglas de escalamiento. Concluimos que para obtener el comportamiento auto-similar de esas propiedades físicas calculables son necesarios los potenciales auto-similares. Además, la modificación de la geometría de los potenciales afecta drásticamente a las propiedades y a los patrones auto-similares. Por tanto, aparecen nuevas reglas de escalamiento. Las reglas de escalamiento, depende de cada sistema, el hecho de tener estructuras auto-similares no garantiza reglas de escalamiento.

Las estructuras complejas (por ejemplo, estructuras auto-similares, Fibonacci y Thue Morse) en general son ventajosas para mejorar los efectos termoeléctricos [29, 63] y se puede observar principalmente en el coeficiente Seebeck en este estudio. En este sentido, sería interesante ampliar el estudio del comportamiento auto-similar en otros materiales $2D$ utilizando estructuras auto-similares. Creemos que esas estructuras y sus reglas de escalamiento podrían ayudar a predecir el transporte electrónico y los efectos termoeléctricos como la conductancia, el coeficiente Seebeck y la potencia térmica, ya que son escalables.

Otro punto a comentar es la generación en la que surgen características auto-similares. Dado que es poco probable que las primeras generaciones de estas estructuras complejas sean auto-similares, no cabe esperar que las propiedades físicas presenten auto-similaridad. El comportamiento auto-similar suele aparecer hasta la séptima generación.

Otra cuestión es que, en una situación ideal, el factor de escala, $L_x/3^i$, seguiría la misma regla de escala que la obtenida en los espectros de transmisión, pero no es así.

Otro punto interesante es que hay que tener cuidado con los parámetros utilizados en la estructura, por ejemplo, la anchura principal de la estructura y la altura de la barrera principal, en este sentido, el primer parámetro tiene el riesgo de cruzar el límite de la aproximación lineal en grafeno. Mientras tanto, el segundo puede superar la distancia

entre átomos de carbono, en particular la última generación de la estructura, en lo que respecta a la anchura de la barrera.

Presumiblemente, como la altura de las nuevas barreras añadidas disminuye gradualmente de generación i a $i+1$, no tendrían ningún efecto a las curvas de transmisión. Sin embargo, no es así, porque a medida que aumenta la generación, cambia la amplitud de las oscilaciones y , en consecuencia, el coeficiente de transmisión es diferente.

Finalmente, En este estudio, termina explorando los estados cuasi-localizados (QBS) en potenciales rectangulares simples y dobles utilizando en grafeno. Calculamos las energías de resonancia y la función de densidad de probabilidad para determinar la localización espacial de los QBS. Descubrimos que los QBS se localizan por encima de la barrera y que pueden ajustarse mediante el ajuste de la anchura y la altura de la barrera. Curiosamente, los QBS también aparecen en el caso de barreras dobles y sus niveles de energía se ven afectados por la anchura del pozo entre las barreras. El estudio es único en el sentido de que calculó la función de onda y estableció la región espacial donde se localizan estos estados.

Bibliografía

- [1] Andre K Geim and Konstantin S Novoselov. The rise of graphene. In *Nanoscience and technology: a collection of reviews from nature journals*, pages 11–19. World Scientific, 2010. [1](#), [5](#)
- [2] Sergei Vladimirovich Morozov, Konstantin Sergeevich Novoselov, and Andre K Geim. Electron transport in graphene. *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, 178(7):776–780, 2008. [1](#)
- [3] AH Castro Neto, Francisco Guinea, Nuno MR Peres, Kostya S Novoselov, and Andre K Geim. The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, 81(1):109, 2009. [1](#)
- [4] Kostya S Novoselov, Andre K Geim, Sergei V Morozov, D Jiang, Y. Zhang, Sergey V Dubonos, Irina V Grigorieva, and Alexandr A Firsov. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306(5696):666–669, 2004. [1](#)
- [5] S Yi Zhou, G-H Gweon, AV Fedorov, de First, PN, WA De Heer, D-H Lee, F Guinea, AH Castro Neto, and A Lanzara. Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene. *Nature Materials*, 6(10):770–775, 2007. [1](#), [14](#)

-
- [6] Melquiades de Dios-Leyvfa, Michael A Hernández-Bertrán, Volodymyr Akimov, Juan A Vinasco, Alvaro L Morales, and Carlos A Duque. Magneto-optical properties of fibonacci graphene superlattices. *The European Physical Journal B*, 93(3):1–7, 2020. [1](#)
- [7] Cory R Dean, L Wang, P Maher, C Forsythe, Fereshte Ghahari, Y Gao, Jyoti Katoch, M Ishigami, P Moon, M Koshino, et al. Hofstadter’s butterfly and the fractal quantum hall effect in moiré superlattices. *Nature*, 497(7451):598–602, 2013.
- [8] Lifeng Sun, Chao Fang, Yu Song, and Yong Guo. Transport properties through graphene-based fractal and periodic magnetic barriers. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 22(44):445303, 2010. [1](#)
- [9] B Huard, JA Sulpizio, N Stander, K Todd, B Yang, and D Goldhaber-Gordon. Transport measurements across a tunable potential barrier in graphene. *Physical Review Letters*, 98(23):236803, 2007. [1](#)
- [10] S Mukhopadhyay, R Biswas, and C Sinha. Resonant tunnelling in a fibonacci bilayer graphene superlattice. *Physica Status Solidi (b)*, 247(2):342–346, 2010. [1](#)
- [11] SHR Sena, JM Pereira Jr, GA Farias, MS Vasconcelos, and EL Albuquerque. Fractal spectrum of charge carriers in quasiperiodic graphene structures. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 22(46):465305, 2010.
- [12] DS Díaz-Guerrero, LM Gaggero-Sager, I Rodríguez-Vargas, and O Sotolongo-Costa. Scaling behavior in the transmission coefficient for a self-affine multi-barrier system using graphene. *Europhysics Letters*, 111(5):57006, 2015. [1](#), [2](#), [25](#), [32](#), [36](#)
- [13] Wei-Tao Lu, Shun-Jin Wang, Yong-Long Wang, Hua Jiang, and Wen Li. Transport properties of graphene under periodic and quasiperiodic magnetic superlattices. *Physics Letters A*, 377(19-20):1368–1372, 2013. [1](#)
- [14] Jean-François Gouyet. *Physics and fractal structures*. Springer Verlag, 1996. [1](#)
- [15] JW Cannon. The fractal geometry of nature. by Benoit B. Mandelbrot. *The American Mathematical Monthly*, 91(9):594–598, 1984. [1](#)
- [16] Michael F Barnsley. *Fractals everywhere*. Academic Press, 2014. [1](#)
- [17] Jens Feder. *Fractals*. Springer Science & Business Media, 2013. [1](#)

-
- [18] Jonathan A Fan, Woon-Hong Yeo, Yewang Su, Yoshiaki Hattori, Woosik Lee, Sung-Young Jung, Yihui Zhang, Zhuangjian Liu, Huanyu Cheng, Leo Falgout, et al. Fractal design concepts for stretchable electronics. *Nature Communications*, 5:3266, 2014. [2](#)
- [19] MS Fairbanks, DN McCarthy, SA Scott, SA Brown, and RP Taylor. Fractal electronic devices: simulation and implementation. *Nanotechnology*, 22(36):365304, 2011. [2](#)
- [20] Francesco De Nicola, Nikhil Santh Puthiya Purayil, Vaidotas Mišeikis, Davide Spirito, Andrea Tomadin, Camilla Coletti, Marco Polini, Roman Krahné, and Vittorio Pellegrini. Graphene plasmonic fractal metamaterials for broadband photodetectors. *Scientific Reports*, 10(1):1–10, 2020. [2](#)
- [21] DS Díaz-Guerrero, Isaac Rodríguez-Vargas, Gerardo G Naumis, and LM Gaggero-Sager. Self-similar charge transmission in gapped graphene. *Fractals*, 24(02):1630002, 2016. [2](#), [25](#), [32](#), [36](#), [40](#)
- [22] Rogelio Rodríguez-González, Isaac Rodríguez-Vargas, Dan Sidney Díaz-Guerrero, and Luis Manuel Gaggero-Sager. Self-similar transmission properties of aperiodic cantor potentials in gapped graphene. *The European Physical Journal B*, 89(1):1–11, 2016. [14](#), [28](#), [32](#), [36](#), [40](#), [43](#)
- [23] R Rodríguez-González and I Rodríguez-Vargas. The role of fractal aperiodic order in the transmittance, conductance and electronic structure of graphene-based systems. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 69:177–185, 2015. [2](#), [13](#), [14](#), [16](#), [32](#)
- [24] Heraclio García-Cervantes, Luís Manuel Gaggero-Sager, Dan Sidney Díaz-Guerrero, Oscar Sotolongo-Costa, and Isaac Rodríguez-Vargas. Self-similar conductance patterns in graphene cantor-like structures. *Scientific Reports*, 7(1):1–10, 2017. [2](#), [32](#), [43](#)
- [25] Alex Zevalkink, David M Smiadak, Jeff L Blackburn, Andrew J Ferguson, Michael L Chabinyk, Olivier Delaire, Jian Wang, Kirill Kovnir, Joshua Martin, Laura T Schelhas, et al. A practical field guide to thermoelectrics: Fundamentals, synthesis, and characterization. *Applied Physics Reviews*, 5(2):021303, 2018. [2](#)
- [26] EH Hwang, E Rossi, and S Das Sarma. Theory of thermopower in two-dimensional graphene. *Physical Review B*, 80(23):235415, 2009. [2](#)

-
- [27] Clemens Forman, Ibrahim Kolawole Muritala, Robert Pardemann, and Bernd Meyer. Estimating the global waste heat potential. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 57:1568–1579, 2016. [2](#)
- [28] Philippe Dollfus, Viet Hung Nguyen, and Jérôme Saint-Martin. Thermoelectric effects in graphene nanostructures. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 27(13):133204, 2015. [2](#), [9](#)
- [29] R Rodríguez-González, LM Gaggero-Sager, and I Rodríguez-Vargas. Self-similar transport, spin polarization and thermoelectricity in complex silicene structures. *Scientific Reports*, 10(1):1–19, 2020. [2](#), [51](#)
- [30] LD Hicks and Mildred S Dresselhaus. Effect of quantum-well structures on the thermoelectric figure of merit. *Physical Review B*, 47(19):12727, 1993. [2](#)
- [31] Mildred S Dresselhaus, Gang Chen, Ming Y Tang, RG Yang, Hohyun Lee, DZ Wang, ZF Ren, J-P Fleurial, and Pawan Gogna. New directions for low-dimensional thermoelectric materials. *Advanced Materials*, 19(8):1043–1053, 2007. [2](#)
- [32] S Molina-Valdovinos, EJ Guzmán, and I Rodríguez-Vargas. Low-dimensional thermoelectricity in aperiodic gated graphene superlattices. *Journal of Applied Physics*, 127(15):154302, 2020. [3](#)
- [33] KE Nagaev. On the shot noise in dirty metal contacts. *Physics Letters A*, 169(1-2):103–107, 1992. [3](#)
- [34] Jakub Tworzydło, Björn Trauzettel, Misha Titov, Adam Rycerz, and Carlo WJ Beenakker. Sub-poissonian shot noise in graphene. *Physical review letters*, 96(24):246802, 2006. [3](#)
- [35] Ya M Blanter and Markus Büttiker. Shot noise in mesoscopic conductors. *Physics reports*, 336(1-2):1–166, 2000. [3](#)
- [36] MJM De Jong and CWJ Beenakker. Semiclassical theory of shot noise in mesoscopic conductors. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 230(1-2):219–248, 1996. [3](#)
- [37] R Danneau, F Wu, MF Craciun, S Russo, MY Tomi, J Salmilehto, AF Morpurgo, and Pertti J Hakonen. Shot noise in ballistic graphene. *Physical review letters*, 100(19):196802, 2008. [3](#)

- [38] J Tworzydło, B Trauzettel, Misha Titov, A Rycerz, and CWJ Beenakker. Quantum-limited shot noise in graphene. *arXiv preprint cond-mat/0603315*, 2006. 3
- [39] Xiao-Xiao Guo, De Liu, and Yu-Xian Li. Conductance and shot noise in graphene superlattice. *Applied Physics Letters*, 98(24):242101, 2011. 3
- [40] Pei-Liang Zhao and Xi Chen. Electronic band gap and transport in fibonacci quasi-periodic graphene superlattice. *Applied Physics Letters*, 99(18):182108, 2011. 3
- [41] Farhad Sattari. Shot noise in magnetic field modulated graphene superlattice. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 72:134–139, 2015.
- [42] Tianxing Ma, Chun Liang, Li-Gang Wang, and Hai-Qing Lin. Electronic band gaps and transport in aperiodic graphene superlattices of thue-morse sequence. *Applied Physics Letters*, 100(25):252402, 2012.
- [43] Xi Chen, Pei-Liang Zhao, and Qi-Biao Zhu. Double-periodic quasi-periodic graphene superlattice: non-bragg band gap and electronic transport. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 46(1):015306, 2012. 3
- [44] Huaping Huang, De Liu, Hongmei Zhang, and Xiaojun Kong. Electronic transport and shot noise in thue-morse sequence graphene superlattice. *Journal of Applied Physics*, 113(4):043702, 2013. 3
- [45] Philip Richard Wallace. The band theory of graphite. *Physical review*, 71(9):622, 1947. 5
- [46] Paul Adrien Maurice Dirac. The quantum theory of the electron. part ii. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 118(779):351–361, 1928. 6
- [47] Oskar Klein. Die reflexion von elektronen an einem potentialsprung nach der relativistischen dynamik von dirac. *Zeitschrift für Physik*, 53(3-4):157–165, 1929. 6
- [48] Carl D Anderson. The positive electron. *Physical Review*, 43(6):491, 1933. 6
- [49] Mikhail Iosifovich Katsnelson, Konstantin Sergejevič Novoselov, and Andre Konstantin Geim. Chiral tunnelling and the klein paradox in graphene. *Nature physics*, 2(9):620–625, 2006. 7
- [50] Paul L McEuen, Marc Bockrath, David H Cobden, Young-Gui Yoon, and Steven G Louie. Disorder, pseudospins, and backscattering in carbon nanotubes. *Physical Review Letters*, 83(24):5098, 1999. 7

- [51] Supriyo Datta. *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge university press, 1997. [8](#), [17](#)
- [52] Rolf Landauer. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. *IBM Journal of research and development*, 1(3):223–231, 1957. [8](#)
- [53] Ranjan Kumar and Ranber Singh. *Thermoelectricity and Advanced Thermoelectric Materials*. Woodhead Publishing, 2021. [9](#)
- [54] JM Ziman. *Electrons and phonons: the theory of transport phenomena in solids* (clarendon, oxford). 1960. [9](#)
- [55] Melvin Cutler and N Francis Mott. Observation of anderson localization in an electron gas. *Physical Review*, 181(3):1336, 1969. [10](#), [17](#)
- [56] Heinz-Otto Peitgen, Hartmut Jürgens, and Dietmar Saupe. *Fractals for the classroom: part one introduction to fractals and chaos*. Springer Science & Business Media, 2013. [11](#)
- [57] Peter Markos and Costas M Soukoulis. *Wave propagation: from electrons to photonic crystals and left-handed materials*. Princeton University Press, 2008. [16](#), [45](#)
- [58] A.V. Fedorov P.N. First W.A. de Heer D. H. Lee F. Guinea A.H. Castro-Neto A. Lanzara S. Y. Zhou, G. H. Gweon. Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene. *Nat. Mater.*, 2007. [23](#)
- [59] N. M. R. Peres J. Viana. Gomes. Tunneling of dirac electrons through spatial regions of finite mass. *J. Phys.: Condens. Matter.*, 2008. [23](#)
- [60] Mohammed Miniya, Dan S. Díaz-Guerrero, Luis M. Gaggero-Sager, and Outmane Oubram. Scaling transformations among electron transmission curves for golden self-affine multibarrier structures based on graphene. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 144:115420, 2022. [24](#), [25](#), [26](#)
- [61] M. Miniya, O. Oubram, A. G. El Hachimi, and L. M. Gaggero-Sager. Fano factor in self-similar multibarrier structure based on graphene monolayer. *Journal of Applied Physics*, 131(2):024303, 2022. [29](#), [31](#), [33](#)
- [62] M. Miniya, O. Oubram, A. G. Reynaud-Morales, I. Rodríguez-Vargas, and L. M. Gaggero-Sager. Thermoelectric effects in self-similar multibarrier structure based on monolayer graphene. *Fractals*, 30(03):2250068, 2022. [34](#), [35](#), [36](#), [37](#), [38](#), [39](#), [40](#)

-
- [63] EJ Guzmán, O Navarro, O Oubram, and I Rodríguez-Vargas. Transport properties and thermoelectric effects in gated silicene superlattices. *Journal of Applied Physics*, 124(14):144305, 2018. [51](#)



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS



INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS
Jefatura de Posgrado en Ingeniería y Ciencias Aplicadas



Cuernavaca, Morelos, 31 de agosto de 2023.

DR. JUAN CARLOS GARCÍA CASTREJÓN
COORDINADOR DEL POSGRADO
EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS
P R E S E N T E

Atendiendo a la solicitud para emitir DICTAMEN sobre la revisión de la TESIS titulada: Propiedades de transporte en grafeno, que presenta el alumno **MOHAMMED MINIYA**, para obtener el título de **DOCTORADO EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS**.

Nos permitimos informarle que nuestro voto es **APROBATORIO**.

Atentamente
Por una humanidad culta

DR. VOLODYMYR GRIMALSKY

DR. DIEGO SEURET JIMÉNEZ

DR. ROLANDO PÉREZ ÁLVAREZ

DRA. LORENA DÍAZ GONZÁLEZ

DR. OUTMANE OUBRAM

DR. ISAAC RODRÍGUEZ VARGAS

DR. LUIS MANUEL GAGGERO SAGER

Se adiciona efirma UAEM



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

LORENA DIAZ GONZALEZ | Fecha:2023-08-31 13:53:24 | Firmante

jeIFyWjXbtcvYjNyggbV1sKRmxSCGt5ENQ7Sle+flXxFSYrHa4DyxbjAJQUN+f0SafA7UKmlhV03KbAZ6ustsuhYYiLmPR80o4CEXChinv+To12s7wSaCHD2mFy8RiwFUUagKytU
Gk3xPZmsh8ETuv2HQfQzFgPmB+1XHt1s7sWakR1c9B9gAYSzZoPjy1j++G8iILBeyEMb+ZZfT02fzXZwqOKz0JQRi8yYKMQpeKwqPP++Ka7RhojelcMkPz6Fv74CUqvXPlp1xS
hdYtK2ZSi8lImZG7WRr8eR0B9epgBTZGhei6A+0yC+Is5GrkO6oW1UHvI3hOxA7nU2F8KVUQ==

DIEGO SEURET JIMENEZ | Fecha:2023-09-01 00:57:50 | Firmante

poJBQij/lzBTqXFbEiog+xtNq2QuL8euk6JmWsjWWy6X7T8A3F7VU+vxkHhllfAcuzLObtMQrCtuCs0W1QZp/N2YsfKr2AC4s7R3r+fF276LUwN6njsXZ9+mEiTDWXmmv1VYqDnD
KYQ9zBSaCb1/n5bmhoxU4LVk5kyq9owRVQ4Qr+qI6y9f6bqqzDgtLupebcy2vW8Rxo47vBeBhes0WQjrMHAms4XAk+8eFGKSEnSp+EBLrVMcBgaGJT88qEIL+wkkoQo4XhT
6FCDHxpd1ZCH9Xuup18h+GngURdtYJXgVX0f0D/zS+1P87Qk92K/rdJeCUwo5cA6Bw3AnA==

ISAAC RODRÍGUEZ VARGAS | Fecha:2023-09-01 10:57:33 | Firmante

c3pbFegM8Vx9gL+ZNLfTh4xIEhI8db17gFJwuZfYgPVEKQ8t6cW72pzqEdgP61cDjHeSk7IsCARbznXHk5FeilvT7B8/Ns5rcVinV54Z1D4iKss4Te3QKpsM8qcFFE7Wj0SPcJV1Noq
SgbnjNKRKDsJrBirkle7pp3hPslHFrfJBra+xNDU0o7zyJmAdZpGh0EowEyM7bSva0QAbZ7vemJL7kS5IYhqv9d2mzZ8ztzA/lr+xCEWoyP33+66WYt0wrRQ60BtlfmNxsQJx4Xi7
dUFyYoL0xSUs0o72lrq20mi8wKvs+n7FYBBc9ASyaBTAZ5zv2zBt/0lz/LeEfg==

OUTMANE OUBRAM | Fecha:2023-09-01 10:58:33 | Firmante

XxFzrcDcRps7jN8ijn7C/qH1MKbCsmDQd9Jf/T23tEuE/J09J3qyCb97GYysj/i/2JWB99SHcDRjLUUsID24pgh9nGS5MjX07nai7uCDdazElrJf5eyZePGJaEbAHOxPbyZoE3ioMUsQ
52aM/lziy5HVFAWii4odnlF2/fmVkwSt5VhLP0K45j39xyN4mDfB3ZBbvOybvM3UdQYom5iNrm9/S7pxKCEG0rjVKWRijufNYEvSVtksGqAFhSGjmXqDKhcPPZ2gmrKlJY9mVV+Lh
wwwmGYL7an5bQDqrU0j3HK/Yhk8/X3mSlmlB2SxvqrEv/ePby0PJMQu0Ea5YZzg==

ROLANDO PEREZ ALVAREZ | Fecha:2023-09-08 10:54:15 | Firmante

M7NpkicuFABqfhiG0tAowsWP0w8SZnLfnKqnTFUrpndZ4BkyE867P6X0InxFgJl0mbcZrztz2HUvtQ4bXA1m4m+4uhxKivuuuxklFureXOekNMsWY24mBmbtXd4eganVijimw
L9gZL8Y7ZqrM61inMYjz4G7xYxMUUpQtHGfsXtUqtPuK+V/K7Ekw02ZS00uUaVWkZ5XVhKUC3RXAZTIFyOokx3tcRs2H8aVvcY01GtcxPE56IEcOpOYnQ7rVunsJoOoRAYyU3T8
E1L2efo9dtn69wBW+w7oSK3+Q/V83UmqpFkTglQYnoUdtgT43C6raUDB6spq9IV7HviiTxsQ==

LUIS MANUEL GAGGERO SAGER | Fecha:2023-09-13 15:09:07 | Firmante

SY/c/T7KFUpIhR89cxghhpBt8CZ5RWEUoAkv2rzl0TvjOAW6xuRQV56sSCRLzLjBKlrDXBwbpAjtZ07NF7j0KDXRf3aWL75PEllIPxhKkYfDb5j7WxsJSdfhQLrndZjPzfzPJZ60
JNvM4Ql2UyqhFI/K2Xz2TF5gotYr/yvOthaGhBjyOIDG0BI9z8yLE6aOxbWAO0gyagwCAzCbyyGzySjZOT33bd8yx5DRz+hoE424GcdQtUL3np7/cFICFWKg1cmf32mcohf4sZdk
3H3RX9gcdUlInSUIhKfBfAvauzrdFUWqMkA+131c9aoYPmluHXGE/GLM3jug+Xv2UMfA==

VOLODYMYR GRIMALSKY | Fecha:2023-09-20 11:07:05 | Firmante

hhTwhgg/c1Qcu6REpY1xLfcEVBLywhDh90ktgQno4hjqzPmLbn9A+3ZAI0CAoRTFpBkndMzkk69kiPp3B0J8eCqCVXpSWnBcbGeK+9VExiqj3CdeNHMNU/nKhGn+9Y2B2Sp5ok
JTtAorkSQohtnDUKMnsH87atff8m5KOQjPkqjNlrh1HoAC/uS+kFxtu6jwxAPwEapeRZPLLDm73FgDMI1nSZJQQHMAbC7KOC2A2gIH2ZCH3bOpxl7SABoGQFVprdao5r4EPKGq/
elClfl9DyVyKTVKTI9jmoOFHbDqmRAfprTIF7BahtKGWQdkiKaJWwlf799/tqDGE0KkXI5Q==

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



8G9Qsv4Dn

<https://efirma.uaem.mx/noRepudio/S9LrEshGLBS4skbl98BNGHs8Eo3yoNg9>

