



Universidad Autónoma de Zacatecas

“Francisco García Salinas”

Unidad Académica de Física

---



# Propiedades de auto-similaridad y escalamiento en estructuras aperiódicas fractales de grafeno

## T E S I S

Que para obtener el grado de  
**DOCTOR EN CIENCIAS BÁSICAS**  
(Orientación en Física)

PRESENTA

**M. en C. Rogelio Rodríguez González**

DIRECTOR DE TESIS

**Dr. Isaac Rodríguez Vargas**

Zacatecas, México

Junio de 2018.

*A mis hijos Ashley Nicole y Rogelio.*



## Agradecimientos

En primer lugar quiero agradecer a la Universidad Autónoma de Zacatecas por abrirme las puertas para realizar mis estudios de doctorado. En particular, agradezco a la Unidad Académica de Física por darme la oportunidad de estudiar así como por las herramientas y el espacio brindado para formarme como un profesionista.

También me gustaría agradecer ampliamente al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por el soporte económico a través de su Programa Nacional de Posgrados de Calidad (PNPC), en particular al programa de Doctorado en Ciencias Básicas con número PNPC 3911, mediante la beca nacional durante este tiempo de estudio, ya que gracias a este apoyo logré culminar el presente proyecto. De igual manera agradezco a la Universidad Autónoma del Estado de Morelos donde realicé mi estancia de investigación con el apoyo de la beca mixta.

Al Consejo Zacatecano de Ciencia Tecnología e Innovación (COZCyT) por el apoyo económico para poder asistir a congresos y talleres.

Le doy gracias a mi Familia por apoyarme en todo momento y por depositar su confianza en mí, especialmente a mi esposa Karina y a mis hijos Ashley Nicole y Rogelio, que siempre me han impulsado para lograr esta meta.

A mi director de tesis, Dr. Isaac Rodríguez Vargas por su visión crítica de muchos aspectos cotidianos de la vida, por su rectitud en su profesión como docente, quien con sus consejos, sus enseñanzas, su paciencia y su motivación, me formó como persona e investigador.

Agradezco a todos los profesores que me impartieron clases durante este tiempo y me formaron como un verdadero profesionista.

A mis amigos y compañeros del doctorado por brindarme su amistad, su apoyo y por las experiencias vividas.



# Propiedades de auto-similaridad y escalamiento en estructuras aperiódicas fractales de grafeno

## Resumen

Una de las principales tareas en el campo de la ciencia es indagar nuevos materiales que faciliten cierto trabajo diario. En este sentido, la investigación juega un papel trascendente, ya que gracias a ella estos materiales pueden ser implementados en el ámbito científico y tecnológico. Recientemente el descubrimiento de materiales bidimensionales a generado un gran interés en la comunidad científica y experimental, en particular, el grafeno. Por otro lado, en los últimos años las estructuras aperiódicas o cuasi-regulares se han utilizado para describir una amplia gama de fenómenos físicos. En este sentido, la conjugación de esta clase de estructuras con el grafeno han logrado demostrar efectos exóticos tales como el transporte auto-similar.

En este trabajo investigamos las peculiaridades de los electrones de Dirac a través de estructuras aperiódicas de grafeno tipo Cantor (CGSs). Hemos implementado el orden aperiódico en la distribución de las barreras y pozos de potencial de acuerdo a la secuencia del conjunto Cantor. En primer lugar, comparamos las propiedades de transmisión y transporte en dos clases de CGSs generadas por sustratos nano-estructurados y por campo electrostático. En general, la conductancia de ambos sistemas presenta un comportamiento oscilatorio que se puede describir directamente por medio de los estados acotados. En segundo lugar, investigamos las propiedades de transmisión en los dos sistemas descritos anteriormente, donde hemos encontramos un comportamiento auto-similar en los espectros de transmisión. Para ello, implementamos y proponemos reglas de escala para cada uno de los parámetros fundamentales: número de generación, altura de las barreras y longitud del sistema. Teniendo esto en cuenta, hemos podido reproducir el espectro de transmisión de referencia, aplicando la regla de escala apropiada, por medio del espectro de transmisión escalado. Por lo tanto, hasta donde podemos ver, los ingredientes básicos para obtener

auto-similaridad en las propiedades de transmisión son: electrones de Dirac relativistas, una estructura auto-similar y la no conservación del pseudo-espín.

En tercer lugar, discutimos teóricamente las propiedades de transmisión y transporte de los electrones de Dirac en CGSs bajo efectos magnetoeléctricos. Encontramos un proceso de bifurcación en el espectro de transmisión que es observable cuando aumenta la generación. Además, se presenta un comportamiento simétrico y asimétrico para las barreras magnéticas y magnetoeléctricas, respectivamente. En general, se manifiesta un comportamiento oscilatorio en la conductancia. Además, podemos describir la forma y ubicación de los picos que dan lugar a las oscilaciones a través de los contornos de transmisión en el espacio  $(E, k_y)$ . Por consiguiente, la modulación magnetoeléctrica junto con el orden fractal se pueden usar para controlar las propiedades de transmisión y transporte en CGSs. Por último, retomamos el sistema generado por campo magnético y electrostático solo que ahora investigamos patrones auto-similares en las propiedades de transmisión. Además, estos patrones se pueden conectar con otros a diferentes escalas a través de expresiones de escala bien definidas. Aquí, hemos encontrado dos reglas de escala, la primera está relacionada con la generación y la segunda con la longitud de la estructura tipo Cantor. Hasta donde sabemos, es la primera vez que una estructura especial auto-similar junto con efectos de campo magnético dan lugar a patrones de transmisión auto-similares. También es importante señalar que, según nuestro conocimiento, es fundamental romper la simetría del grafeno para obtener propiedades de transmisión auto-similares. De hecho, en nuestro caso, la simetría de inversión temporal se rompe gracias a los efectos del campo magnético.

# Self-similarity and scalability properties in graphene fractal aperiodic structures

## Abstract

One of the major tasks in the field of science is to investigate new materials that facilitate certain day-to-day work. In this sense, the research plays a transcendent role, since thanks to it these materials can be implemented in the scientific and technological field. Recently the discovery of two-dimensional materials has generated great interest in the scientific and experimental community, in particular, the graphene. On the other hand, in recent years aperiodic or quasi-regular structures have been used to describe a wide range of physical phenomena. In this sense, the conjugation of this class of structures with graphene have been able to show exotic effects such as self-similar transport.

In this work we investigate the peculiar tunneling characteristics of Dirac electrons through aperiodic graphene structures like Cantor (CGSs). We have implemented the aperiodic order to the barriers and potential wells arranged according to the Cantor sequence. First, we compare the transmission and transport properties of two types of CGSs generated by nanostructured substrates and by electrostatic field. In general, the conductance of both systems presents an oscillatory behaviour that can be described directly by means of the bound states. Second, we investigate the transmission properties in the two systems described above, where we have found a self-similar behaviour in the transmission spectra. To do this, we implement and propose scaling rules for each one of the fundamental parameters: generation number, height of the barriers and length of the system. With this in mind we have been able to reproduce the reference transmission spectrum, applying the appropriate scaling rule, by means of the scaled transmission spectrum. Therefore, as far as we can see the basic ingredients to obtain self-similarity in the transmission spectra are: relativistic Dirac electrons, a self-similar structure and the non-conservation of the pseudo-spin.

Thirdly, we discuss theoretically the transmission and transport properties of Dirac electrons in CGSs under magnetoelectric effects. We found a bifurcation process in the transmission spectra which is observable when the generation increases. Also, an asymmetrical and symmetrical behavior is presented for magnetic and magnetoelectric barriers, respectively. In general, an oscillatory behavior is manifested in the conductance. Moreover, we can describe form and location of the peaks that give rise to the oscillations through the contour plots of the transmittance in the  $(E, k_y)$  space. In short, the magnetoelectric modulation along with the fractal order can be used to control the transmission and transport properties in CGSs. Finally, we take up again the system generated by magnetic and electrostatic field only now we investigate the self-similar patterns in the transmission properties. Moreover, these patterns can be connected with other ones at different scales through well-defined scaling rules. In particular, we have found two scaling rules, the first expression is related to the generation and the second one to the length of the Cantor-like structure. As far as we know it is the first time that a special self-similar structure in conjunction with magnetic field effects give rise to self-similar transmission patterns. It is also important to remark that according to our knowledge it is fundamental to break some symmetry of graphene in order to obtain self-similar transmission properties. In fact, in our case the time-reversal symmetry is broken by the magnetic field effects

---

## Índice general

---

Dedicatoria	III
Agradecimientos	VI
Resumen	IX
Índice	XII
<b>1. Transmisión y transporte en sistemas aperiódicos</b>	<b>1</b>
1.1. Introducción . . . . .	1
1.1.1. Orden aperiódico . . . . .	1
1.1.2. Conjunto Cantor . . . . .	3
1.1.3. Estructuras aperiódica en grafeno . . . . .	4
1.2. Motivación . . . . .	5
1.3. Objetivos . . . . .	6
1.4. Metodología . . . . .	6
1.4.1. Barreras vía sustratos nano-estructurados . . . . .	7

1.4.2.	Barreras vía campo electrostático . . . . .	9
1.4.3.	Matriz de transferencia . . . . .	11
1.4.4.	Esquema de estados acotados . . . . .	19
1.4.5.	Transporte: conductancia . . . . .	20
1.5.	Resultados . . . . .	20
1.6.	Conclusiones . . . . .	26
<b>2.</b>	<b>Reglas de escala en sistemas aperiódicos</b>	<b>29</b>
2.1.	Introducción . . . . .	29
2.1.1.	Auto-similitud . . . . .	29
2.2.	Motivación . . . . .	35
2.3.	Objetivos . . . . .	35
2.4.	Metodología . . . . .	36
2.4.1.	Barreras para estructuras semiconductoras . . . . .	36
2.5.	Resultados . . . . .	38
2.6.	Conclusiones . . . . .	51
<b>3.</b>	<b>Transmisión y transporte con campo magnético</b>	<b>53</b>
3.1.	Introducción . . . . .	53
3.2.	Motivación . . . . .	56
3.3.	Objetivos . . . . .	56
3.4.	Metodología . . . . .	57
3.4.1.	Barreras vía campo magnético . . . . .	57
3.5.	Resultados . . . . .	60
3.6.	Conclusiones . . . . .	71
<b>4.</b>	<b>Reglas de escala con campo magnético</b>	<b>73</b>
4.1.	Introducción . . . . .	73

---

4.2. Motivación . . . . .	77
4.3. Objetivos . . . . .	78
4.4. Metodología . . . . .	79
4.5. Resultados . . . . .	79
4.6. Conclusiones . . . . .	87
<b>5. Conclusiones</b>	<b>89</b>
<b>6. Perspectivas</b>	<b>93</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>94</b>
<b>Publicaciones</b>	<b>105</b>



---

## Transmisión y transporte en sistemas aperiódicos

---

### 1.1. Introducción

#### 1.1.1. Orden aperiódico

En la naturaleza existen diversos sistemas o estructuras complejas que manifiestan cierto tipo de orden. El más común es el orden periódico como consecuencia de su simplicidad. La Fig. 1.1 (a) ilustra una estructura conformada por dos elementos A y B repetidos de manera periódica. En este sentido, el orden periódico tomado en cuenta como una herramienta de modulación periódica desempeña un papel importante en superredes semiconductoras [1–3]. Sin embargo, también hay otro tipo de orden: el orden aperiódico. Esto significa que existen estructuras con reglas de generación bien definidas (orden) pero sin ser repetitivas (periodicidad), denominadas estructuras aperiódicas, cuasi-periódicas o cuasi-regulares [4, 5].

Las estructuras aperiódicas consisten en una sucesión de capas distribuidas de acuerdo

a ciertas reglas de conformación, por lo que el resultado es un sistema no periódico pero con un algoritmo de secuencia preciso para las capas, tal y como se indica en la Fig. 1.1 (b). En otras palabras, una estructura aperiódica puede ser construida con un patrón formado por dos elementos que se repiten con diferentes periodos, y la razón de esos periodos es irracional. De hecho, este tipo de estructuras pueden ser consideradas como fractales, objetos homogéneos y auto-similares, además de ser utilizadas para describir toda una gama de fenómenos físicos dentro del marco de sistemas complejos, tales como procesos estadísticos y estructuras naturales [4,5]. Por otra parte, estas estructuras pueden caracterizarse por poseer propiedades intrínsecas tales como: auto-similitud, criticidad y fractalidad [6], que de alguna manera se manifiestan en propiedades físicas tales como la transmitancia, conductancia, propiedades electrónicas y ópticas [4, 5]. Por lo tanto, el orden cuasi-periódico o aperiódico podría explotarse para modular las propiedades de las estructuras basadas en semiconductores, así como para diseñar nuevos dispositivos electrónicos.

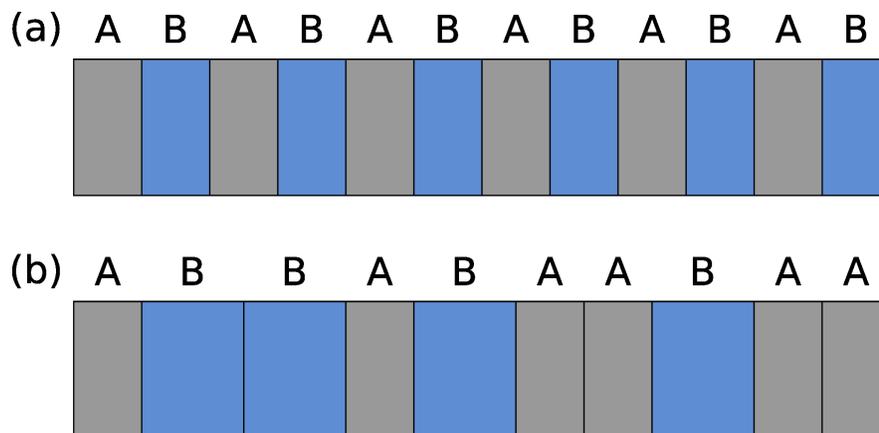


Figura 1.1: (a) Estructura periódica formada por los elementos A y B. (b) Estructura aperiódica generada por medio de dos elementos A y B.

### 1.1.2. Conjunto Cantor

El conjunto Cantor ilustra de una buena manera la importancia y las características fundamentales de los fractales, además de ser considerado como uno de los fractales más simples [7]. Este conjunto se construye de modo recursivo, esto es, se elige un segmento de una unidad de longitud que será denominado, en nuestro caso, como la primera generación  $N = 1$ . Enseguida se parte en 3 segmentos idénticos y se elimina el segmento central, conservando siempre los extremos. Así se obtiene la segunda generación  $N = 2$  con 2 segmentos de longitud de  $1/3$ . Repitiendo el procedimiento anterior a cada uno de los extremos restantes resulta la tercera generación  $N = 3$  con 4 segmentos, donde cada uno de ellos tiene una longitud de  $1/9$ . Para la cuarta generación  $N = 4$  se tienen 8 segmentos de longitud  $1/27$ , ver Fig. 1.2. Por lo tanto, la  $n$ -ésima generación tendrá  $2^{n-1}$  segmentos de longitud  $1/3^{n-1}$  con  $(2^{n-1}-1)$  segmentos removidos. Otra peculiaridad del conjunto Cantor es que se caracteriza por tener una dimensión fractal. Al respecto, existe una gran variedad de formas para encontrar la dimensión fractal entre las que destaca el método o técnica por *conteo de cajas* [7]. Empleando este método resulta que la dimensión fractal del conjunto Cantor es,

$$D = \frac{\ln(2)}{\ln(3)} = 0.6309. \quad (1.1)$$

Es importante señalar que la estructura de la secuencia del conjunto Cantor de la Fig. 1.2 muestra solo las primeras cinco generaciones, las cuales se consideran como un conjunto prefractal debido a que el número de generaciones es finito. Además, la  $n$ -ésima generación del conjunto prefractal Cantor se puede interpretar como una distribución cuasi-periódica (cuasi-regular) de segmentos que se pueden obtener removiendo algunos segmentos dentro de una distribución periódica finita, donde las dos primeras generaciones serían equivalentes en ambas distribuciones.



de un sistema aperiódico fractal basado a grafeno. La secuencia del conjunto Cantor es implementada para generar el arreglo cuasi-regular de las barreras y pozos de potencial. En particular, se efectúa un análisis comparativo de las propiedades físicas mencionadas para dos diferentes estructuras de grafeno tipo Cantor, CGSs. La primera se genera por campo electrostático (ECGSs) mientras que la segunda por sustratos nano-estructurados (SCGSs). A primera instancia, nuestros resultados muestran rasgos auto-similares en los espectros de la transmitancia y conductancia para el caso de SCGSs. Por otro lado, se encontró que en ambas situaciones (ECGSs y SCGSs) la conductancia presenta un comportamiento oscilatorio, el cual puede ser descrito directamente por medio de los estados acotados. Por lo tanto, se presta especial atención a las características auto-similares de las propiedades de transmisión y transporte así como a la naturaleza oscilatoria de la conductancia y su relación con el espectro de los estados acotados.

## 1.2. Motivación

Recientemente la aplicación de estructuras aperiódicas para modular propiedades de transmisión y transporte se ha convertido en una línea de investigación importante para el diseño y elaboración de novedosos dispositivos electrónicos, esto gracias a sus propiedades ofertadas, entre las que destaca la auto-similaridad [4]. A pesar de esos esfuerzos, existen pocos estudios acerca de estructuras aperiódicas, en particular, aquellas que siguen las reglas de generación del conjunto Cantor. Motivo por la cual esta investigación está enfocada en explorar la relación entre la naturaleza de los portadores de carga y su comportamiento dentro de esta clase de estructuras basadas en grafeno.

### 1.3. Objetivos

El objetivo principal, asociado con este primer capítulo, es estudiar teóricamente las propiedades de transmisión y transporte de los electrones de Dirac a través de CGSs. Para llevar a cabo dicho estudio, tomaremos en cuenta dos tipos de sistemas: el primero formados por barreras de potencial generadas por la aplicación de campo electrostático (ECGSs) y el segundo con barreras generadas por sustratos nano-estructurados (SCGSs). En particular, se determinará:

- Las propiedades de la transmitancia de los electrones de Dirac como función de la energía para los dos sistemas ECGSs y SCGSs, al variar el ancho de partida  $w$ , el número de generación de la secuencia Cantor  $N$  y el ángulo de incidencia  $\theta$ .
- Las propiedades de transporte, como lo es la conductancia de los electrones de Dirac en cada estructura: ECGSs y SCGSs. Asimismo, se analizará como se modifican sus propiedades al variar  $w$ ,  $N$  y  $\theta$ .
- Cálculo y análisis de los estados acotados de los electrones de Dirac en ECGSs y SCGSs, con el fin de entender con mayor claridad la naturaleza oscilante de la conductancia.

### 1.4. Metodología

En esta sección se analizan las peculiaridades que caracterizan a ciertos sistemas basados a grafeno. En particular, aquellos sistemas constituidos por barreras de potencial generadas por medio de sustratos nanoestructurados y por campo electrostático. Además, se presenta el aparato matemático de la matriz de transferencia utilizado para el estudio de la propagación de los electrones de Dirac.

### 1.4.1. Barreras vía sustratos nano-estructurados

En este punto, es importante señalar que a bajas energías y cerca de los puntos de Dirac, los portadores de carga en el grafeno pueden considerarse como partículas relativistas. Solo que ahora la velocidad de la luz es remplazada por la velocidad de Fermi  $v_F \approx 10^6 m/s$ . Por consiguiente, los electrones de Dirac estarán gobernados por la ecuación de Dirac en lugar de la ecuación de Schrödinger.

Dentro del contexto de sustratos, se ha reportado que éstos pueden ser nano-estructurados con materiales con diferente grado de interacción con la sábana de grafeno, Fig.1.3 (a). En otras palabras, dichos materiales inducen diferentes brechas prohibidas en el espectro del grafeno modificando la relación de dispersión lineal a parabólica [41], tal y como se ilustra en la Fig.1.3 (b), siendo ésta una característica sobresaliente en este tipo de estructuras. Para tal fin, se podrían usar como materiales el carburo de silicio (SiC), nitruro de boro hexagonal (hBN), etc.

Desde el punto de vista teórico, la dinámica de los electrones de Dirac sometidos a los efectos inducidos por esta clase de materiales será descrita en términos de la ecuación tipo Dirac,

$$[v_F(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) + t'\sigma_z]\psi(x, y) = E\psi(x, y), \quad (1.2)$$

donde  $v_F = 3ta/2\hbar$  es la velocidad de Fermi, con  $a$  la distancia carbono-carbono en el grafeno del orden de  $1.42 \text{ \AA}$ ,  $t$  el factor de medida de interacción de los átomos ( $2.7 \text{ eV}$ ),  $t' = E_g/2$  el alto de la barrera,  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y)$  las matrices de Pauli,  $p = (p_x, p_y)$  el operador de momento y  $\sigma_z$  la componente  $z$  de la matriz de Pauli. Esta ecuación se resuelve dada la siguiente relación de dispersión parabólica,

$$E^2 = \pm\hbar^2 v_F^2 (q_x^2 + q_y^2) + t'^2, \quad (1.3)$$

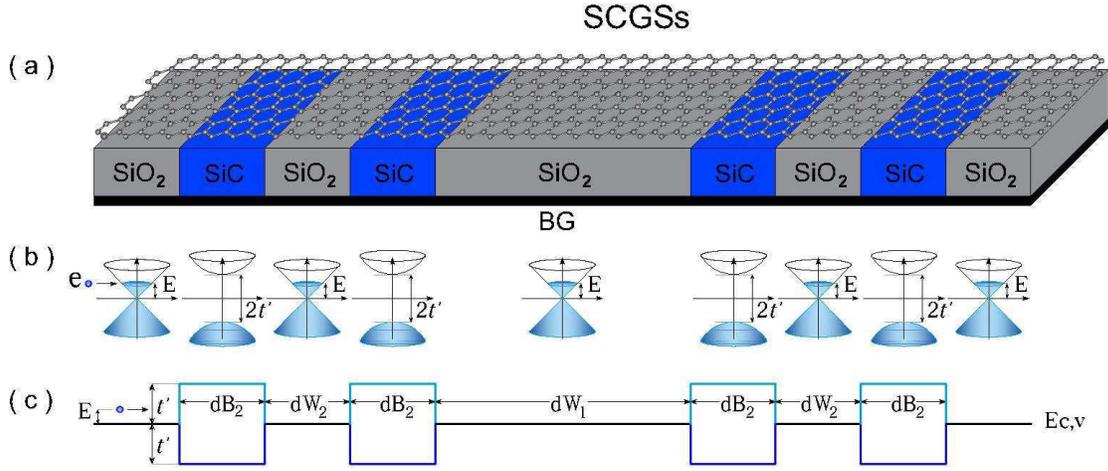


Figura 1.3: Representación gráfica de estructuras de grafeno tipo Cantor basadas en sustratos (SCGSs). (a) Representación de la sección transversal de SCGSs. Esta estructura se genera por la interacción entre el sustrato y la capa de grafeno. La capa de grafeno se deposita encima de sustratos alternantes, como  $\text{SiO}_2$  (regiones grises) y  $\text{SiC}$  (regiones azules), obteniendo regiones con relaciones de dispersión lineal y parabólica, respectivamente. (b) Distribución de los conos de Dirac y paraboloides de Dirac a lo largo de la estructura. La brecha prohibida en los paraboloides de Dirac es  $E_g = 2t'$ , el área llena de azul indica estados ocupados y la esfera azul describe un electrón de Dirac masivo incidiendo con una energía de Fermi ( $E$ ). (c) Perfil de borde de banda de SCGSs, las barreras tienen una altura  $V_0 = t'$ , y los anchos de barreras y pozos son  $dB_2 = w/9$ ,  $dW_2 = w/9$  y  $dW_1 = w/3$ . Las líneas cian y azul corresponden a electrones y huecos, respectivamente. Todas las ilustraciones se presentan para la generación  $N = 3$  del conjunto Cantor.

donde  $t'$  es también proporcional al ancho de la brecha prohibida de valor  $2t'$  y  $q$  es el vector de onda bidimensional correspondiente a la región del  $\text{SiC}$ . Las funciones de onda correspondientes se pueden escribir como,

$$\psi_{\pm}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ v_{\pm} \end{pmatrix} e^{\pm iq_x x + iq_y y}, \quad (1.4)$$

con

$$v_{\pm} = \frac{E - t'}{\hbar v_F (\pm q_x - iq_y)}. \quad (1.5)$$

Por otro lado, existen sustratos incapaces de inducir una brecha prohibida en el espectro

de energía del grafeno, como lo es el SiO<sub>2</sub>, que a su vez conserva la relación de dispersión lineal, ver Fig.1.3 (a) y Fig.1.3 (b). Por consiguiente, la ecuación tipo Dirac viene dada por,

$$[v_F(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})]\psi(x, y) = E\psi(x, y), \quad (1.6)$$

mientras que la energía asociada a estas regiones presenta una forma lineal,

$$E = \pm\hbar v_F k, \quad (1.7)$$

y las funciones de onda están representadas por la expresión,

$$\psi_{\pm}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ u_{\pm} \end{pmatrix} e^{\pm ik_x x + ik_y y}, \quad (1.8)$$

con

$$u_{\pm} = \frac{E}{\hbar v_F(\pm k_x - ik_y)}, \quad (1.9)$$

donde  $k$  es el vector de onda bidimensional correspondiente a la región del SiO<sub>2</sub> y las componentes  $k_x$  y  $k_y$  se definen de acuerdo a la ec. (1.7) así como por el ángulo formando entre ellas,  $\theta = \arctan(k_x/k_y)$ .

### 1.4.2. Barreras vía campo electrostático

Otro de los mecanismos capaces de generar arreglos de barreras de potencial en el grafeno es sin duda alguna la aplicación de campo electrostático por medio de contactos, Fig. 1.4 (a). Como consecuencia, los conos de Dirac sufren un desplazamiento con respecto al eje de la energía, el cual es proporcional a la intensidad del voltaje aplicado  $V_0$ , véase Fig. 1.4 (b). Además, este desplazamiento depende de la polaridad del potencial, por

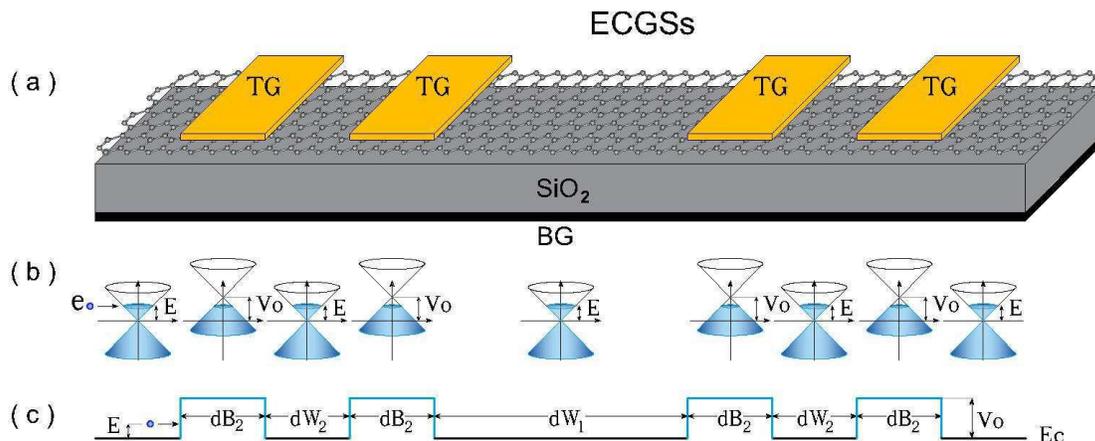


Figura 1.4: Representación gráfica de estructuras de grafeno tipo Cantor basadas en campo electrostático (ECGSs). (a) Representación de la sección transversal de ECGSs. Esta estructura se genera cuando se sitúa una lámina de grafeno sobre un sustrato que no interactúa con el grafeno, tal como SiO<sub>2</sub> (región gris) junto con una puerta (BG) y contactos alternados (TG). (b) Distribución de los conos de Dirac a lo largo de la estructura. En este caso,  $V_0$  es proporcional a la intensidad del voltaje aplicado en los contactos y la puerta. La esfera azul describe un electrón de Dirac sin masa incidiendo con una energía de Fermi ( $E$ ). (c) Perfil de borde de banda de ECGSs con  $V_0$  como la altura de las barreras. La línea cian corresponde a electrones, ya que estamos considerando voltajes positivos. Todas las ilustraciones se presentan para el número de generación  $N = 3$  del conjunto Cantor.

esta razón, cuando es positivo surgen barreras para electrones (Fig. 1.4 (c)) y cuando es negativo barreras para huecos. Lo anterior se puede analizar por medio de la ecuación tipo Dirac,

$$[v_F(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) + V(x)]\psi(x, y) = E\psi(x, y), \quad (1.10)$$

donde  $V(x) = V_0$ , es el potencial unidimensional a lo largo de la dirección espacial  $x$ . Esta ecuación se resuelve en forma directa utilizando la relación de dispersión lineal,

$$E = \pm \hbar v_F q + V_0, \quad (1.11)$$

donde “ $\pm$ ” representa a los electrones y huecos, respectivamente. La función de onda adquiere la misma expresión matemática que en el caso de las barreras generadas por

sustratos ec. (1.4), solo que ahora el coeficiente del bi-espinor se define como,

$$v_{\pm} = \frac{\hbar v_F(\pm q_x - i q_y)}{E - V_0}. \quad (1.12)$$

### 1.4.3. Matriz de transferencia

Una vez definidas las expresiones matemáticas de las relaciones de dispersión y las funciones de onda que caracterizan las barreras de potencial generadas tanto por sustratos nano-estructurados como por campo electrostático, es fácil calcular las propiedades de transmisión, transporte y estructura de niveles de nuestro sistema en cuestión mediante el formalismo de la matriz de transferencia [44, 45].

Para tener mayor claridad del problema a resolver se asumirá de ahora en adelante dos regiones específicas: la *región k* y la *región q*. La primera se refiere a la región ocupada por el sustrato SiO<sub>2</sub> y a la región donde no se aplica campo electrostático, regidas por el vector de onda  $k$ . La segunda comprende el caso de la región ocupada por el sustrato SiC y la región donde se aplica campo electrostático, regidas por el vector de onda  $q$ . En este contexto, las regiones  $k$  y  $q$  estarán caracterizadas por las funciones de onda  $\psi_k^{\pm}$  y  $\psi_q^{\pm}$ , respectivamente.

El enfoque de la matriz de transferencia consiste en establecer una relación entre las amplitudes de la onda incidente y reflejada del medio inicial ( $A_0$  y  $B_0$ ) con las amplitudes de la onda transmitida y reflejada del medio final ( $A_{N+1}$  y  $B_{N+1} = 0$ ) por medio de las condiciones de continuidad de las funciones de onda en cada una de las interfaces, ver Fig. 1.5. Por lo tanto, estableciendo la condición de continuidad en la primera interfaz localizada en  $x = x_0 = 0$ , es decir, entre la onda incidente  $\psi_k^+$  y reflejada  $\psi_k^-$  en la región  $k$  con la onda transmitida  $\psi_q^+$  y reflejada  $\psi_q^-$  en la región  $q$  se obtiene la expresión,

$$\psi_k^{\pm}(0) = \psi_q^{\pm}(0), \quad (1.13)$$

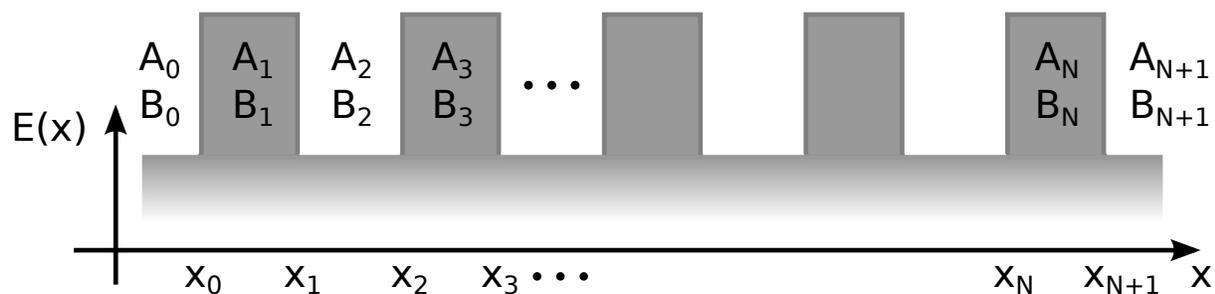


Figura 1.5: Arreglo de barreras de potencial, donde se indican las amplitudes de las funciones de onda en cada una de las regiones que componen el sistema.

o bien,

$$A_0\psi_k^+ + B_0\psi_k^- = A_1\psi_q^+ + B_1\psi_q^-, \quad (1.14)$$

sustituyendo las funciones de onda correspondientes a cada región es posible expresar la ec. (1.14) en forma matricial como,

$$A_0 \begin{pmatrix} 1 \\ u_+ \end{pmatrix} + B_0 \begin{pmatrix} 1 \\ u_- \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} 1 \\ v_+ \end{pmatrix} + B_1 \begin{pmatrix} 1 \\ v_- \end{pmatrix}, \quad (1.15)$$

re-escribiendo esta última ecuación en forma matricial resulta que,

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ u_+ & u_- \end{pmatrix}^{-1}}_{D_0^{-1}} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ v_+ & v_- \end{pmatrix}}_{D_1} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (1.16)$$

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = D_0^{-1} D_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (1.17)$$

aquí  $D_0$  y  $D_1$  se denominan *matrices dinámicas*, las cuales corresponden al medio inicial y final, y al interior de la barrera, respectivamente.

Tomando en cuenta la segunda interfaz localizada en  $x = x_1$  y aplicando la condición

de continuidad obtenemos,

$$\psi_q^\pm(x_1) = \psi_k^\pm(x_1), \quad (1.18)$$

por lo que la ecuación de continuidad adquiere la siguiente forma,

$$A_1\psi_q^+ + B_1\psi_q^- = A_2\psi_k^+ + B_2\psi_k^-, \quad (1.19)$$

considerando la última expresión en términos de las funciones de onda de la región  $k$  y la región  $q$ , entonces,

$$A_1 \begin{pmatrix} 1 \\ v_+ \end{pmatrix} e^{iqx_1} + B_1 \begin{pmatrix} 1 \\ v_- \end{pmatrix} e^{-iqx_1} = A_2 \begin{pmatrix} 1 \\ u_+ \end{pmatrix} e^{ikx_1} + B_2 \begin{pmatrix} 1 \\ u_- \end{pmatrix} e^{-ikx_1}, \quad (1.20)$$

en forma matricial podemos escribir los coeficientes  $A_1$  y  $B_1$  en términos de  $A_2$  y  $B_2$  como,

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{iqx_1} & e^{-iqx_1} \\ v_+ e^{iqx_1} & v_- e^{-iqx_1} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} e^{ikx_1} & e^{-ikx_1} \\ u_+ e^{ikx_1} & u_- e^{-ikx_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}, \quad (1.21)$$

y utilizando la relación,

$$\begin{pmatrix} e^{iqx_1} & e^{-iqx_1} \\ v_+ e^{iqx_1} & v_- e^{-iqx_1} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} e^{-iqx_1} & 0 \\ 0 & e^{iqx_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ v_+ & v_- \end{pmatrix}^{-1}, \quad (1.22)$$

resulta que,

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} e^{-iqx_1} & 0 \\ 0 & e^{iqx_1} \end{pmatrix}}_{P_1} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ v_+ & v_- \end{pmatrix}^{-1}}_{D_1^{-1}} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ u_+ & u_- \end{pmatrix}}_{D_0} \begin{pmatrix} e^{ikx_1} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = P_1 D_1^{-1} D_0 \begin{pmatrix} e^{ikx_1} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}, \quad (1.23)$$

donde  $P_1$  es llamada *matriz de propagación*, la cual representa la propagación de los electrones de Dirac a través de la barrera de ancho  $x_1 - x_0$ . Aquí el medio inicial es el mismo que el final.

Considerando que al final de la barrera ya no hay onda reflejada, resulta que la amplitud  $B_2 = 0$ . De acuerdo a la ec. (1.17) y la ec. (1.23) es posible expresar las amplitudes de las funciones de onda del medio inicial  $A_0, B_0$  en función de las del medio final  $A_2, B_2$  como,

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = D_0^{-1} D_1 P_1 D_1^{-1} D_0 \begin{pmatrix} e^{ikx_1} A_2 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.24)$$

La Matriz de Transferencia  $M_{B1}$  para una barrera se define mediante la expresión,

$$M_{B1} = D_0^{-1} D_1 P_1 D_1^{-1} D_0. \quad (1.25)$$

Por lo tanto, en este caso la transmitancia estará dada por,

$$T_{B1} = \left| \frac{A_2}{A_0} \right|^2, \quad (1.26)$$

$$= \left| \frac{1}{M_{11} e^{ikx_1}} \right|^2, \quad (1.27)$$

$$= \frac{1}{|M_{11}|^2}. \quad (1.28)$$

Para extender el análisis de la matriz de transferencia al caso de dos barrera de potencial utilizaremos los resultados de las dos primeras interfaces del caso de una sola barrera dados por la ec. (1.17) y la ec. (1.23), esto es,

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = D_0^{-1} D_1 P_1 D_1^{-1} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ u_+ & u_- \end{pmatrix}}_{D_2} \begin{pmatrix} e^{ikx_1} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}. \quad (1.29)$$

Ahora, empleando la ecuación de continuidad para la interfaz ubicada en  $x = x_2$ ,

$$A_2 \psi_k^+ + B_2 \psi_k^- = A_3 \psi_q^+ + B_3 \psi_q^-, \quad (1.30)$$

y expresando esta última en términos de las soluciones correspondientes a cada región,

$$A_2 \begin{pmatrix} 1 \\ u_+ \end{pmatrix} e^{ikx_2} + B_2 \begin{pmatrix} 1 \\ u_- \end{pmatrix} e^{-ikx_2} = A_3 \begin{pmatrix} 1 \\ v_+ \end{pmatrix} e^{iqx_2} + B_3 \begin{pmatrix} 1 \\ v_- \end{pmatrix} e^{-iqx_2}, \quad (1.31)$$

de igual manera es posible escribirla en forma matricial,

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ikx_2} & e^{-ikx_2} \\ u_+ e^{ikx_2} & u_- e^{-ikx_2} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} e^{iqx_2} & e^{-iqx_2} \\ v_+ e^{iqx_2} & v_- e^{-iqx_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix}, \quad (1.32)$$

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ikx_2} & 0 \\ 0 & e^{ikx_2} \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ u_+ & u_- \end{pmatrix}^{-1}}_{D_2^{-1}} \begin{pmatrix} e^{iqx_2} & e^{-iqx_2} \\ v_+ e^{iqx_2} & v_- e^{-iqx_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix}. \quad (1.33)$$

Sustituyendo la ec. (1.33) en la ec. (1.29), entonces la relación entre  $A_0$ ,  $B_0$  y  $A_3$ ,  $B_3$  viene dada como,

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = D_0^{-1} D_1 P_1 D_1^{-1} \underbrace{D_2 P_2 D_2^{-1}}_{D_3} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ v_+ & v_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{iqx_2} & 0 \\ 0 & e^{-iqx_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix}, \quad (1.34)$$

con  $P_2$  como la matriz de propagación para la región  $k$  de ancho  $x_2 - x_1$ , definida por,

$$P_2 = \begin{pmatrix} e^{-ik(x_2-x_1)} & 0 \\ 0 & e^{ik(x_2-x_1)} \end{pmatrix}. \quad (1.35)$$

Finalmente, escribimos la ecuación de continuidad en la interfaz ubicada en  $x = x_3$ ,

$$A_3\psi_q^+ + B_3\psi_q^- = A_4\psi_k^+ + B_4\psi_k^-, \quad (1.36)$$

considerando las soluciones adecuadas a cada una de las regiones resulta la expresión,

$$A_3 \begin{pmatrix} 1 \\ v_+ \end{pmatrix} e^{iqx_3} + B_3 \begin{pmatrix} 1 \\ v_- \end{pmatrix} e^{-iqx_3} = A_4 \begin{pmatrix} 1 \\ u_+ \end{pmatrix} e^{ikx_3} + B_4 \begin{pmatrix} 1 \\ u_- \end{pmatrix} e^{-ikx_3}, \quad (1.37)$$

escribiéndola matricialmente,

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{iqx_3} & e^{-iqx_3} \\ v_+ e^{ikq_3} & v_- e^{-iqx_3} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} e^{ikx_3} & e^{-ikx_3} \\ u_+ e^{ikx_3} & u_- e^{-ikx_3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_4 \\ B_4 \end{pmatrix}, \quad (1.38)$$

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-iqx_3} & 0 \\ 0 & e^{iqx_3} \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ v_+ & v_- \end{pmatrix}^{-1}}_{D_3^{-1}} \begin{pmatrix} e^{ikx_3} & e^{-ikx_3} \\ u_+ e^{ikx_3} & u_- e^{-ikx_3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_4 \\ B_4 \end{pmatrix}. \quad (1.39)$$

De la ec. (1.34) y la ec. (1.39), las amplitudes  $A_0$ ,  $B_0$  y  $A_4$ ,  $B_4$  estarán determinadas por,

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = D_0^{-1} D_1 P_1 D_1^{-1} D_2 P_2 D_2^{-1} D_3 P_3 D_3^{-1} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ u_+ & u_- \end{pmatrix}}_{D_4} \begin{pmatrix} e^{ikx_3} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_4 \\ B_4 \end{pmatrix} \quad (1.40)$$

donde  $P_3$  representa la matriz de propagación para la barrera de ancho  $x_3 - x_2$ , definida como,

$$P_3 = \begin{pmatrix} e^{-iq(x_3-x_2)} & 0 \\ 0 & e^{iq(x_3-x_2)} \end{pmatrix}. \quad (1.41)$$

Como nuestro objetivo principal es calcular la transmitancia a través del arreglo de barreras de potencial, entonces  $B_4 = 0$  y además, asumiendo que el medio inicial y el medio final tienen las mismas propiedades, resulta que  $D_4 = D_0$ . Por lo tanto,

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = D_0^{-1} D_1 P_1 D_1^{-1} D_2 P_2 D_2^{-1} D_3 P_3 D_3^{-1} D_0 \begin{pmatrix} e^{ikx_3} A_4 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.42)$$

Definiendo la Matriz de Transferencia  $M_{B2}$  para el caso de dos barreras de potencial como,

$$M_{B2} = D_0^{-1} D_1 P_1 D_1^{-1} D_2 P_2 D_2^{-1} D_3 P_3 D_3^{-1} D_0. \quad (1.43)$$

Entonces,

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = M_{B2} \begin{pmatrix} e^{ikx_3} A_4 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ikx_3} A_4 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.44)$$

Por lo tanto, la transmitancia a través de las dos barreras de potencial viene dada por,

$$T_{B2} = \left| \frac{A_4}{A_0} \right|^2, \quad (1.45)$$

$$= \left| \frac{1}{M_{11} e^{ikx_3}} \right|^2, \quad (1.46)$$

$$= \frac{1}{|M_{11}|^2}. \quad (1.47)$$

Utilizando este procedimiento en cada una de las interfaces restantes de nuestro sistema de barreras y considerando las condiciones de continuidad para todas las funciones de onda

$\psi_k^\pm$  y  $\psi_q^\pm$  es posible encontrar la transmittancia para un arreglo de  $N$  barreras, ver Fig. 1.5.

De manera general resulta la expresión,

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = D_0^{-1} \left[ \prod_{l=1}^N D_l P_l D_l^{-1} \right] D_0 \begin{pmatrix} A_{N+1} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.48)$$

donde  $D_l$ 's y  $P_l$ 's representan las matrices dinámicas y de propagación, respectivamente, de cada una de las regiones que componen el sistema aperiódico definidas por,

$$D_l = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ u_+ & u_- \end{pmatrix} & \text{para la región } k, \\ \\ \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ v_+ & v_- \end{pmatrix} & \text{para la región } q, \end{cases} \quad l = 0, 1, 2, \dots, N, \quad (1.49)$$

con  $u_\pm$  definida en términos de la ec. (1.9) y  $v_\pm$  definidas en términos de la ec. (1.5) y ec. (1.12) para el caso de sustratos y electrostático, respectivamente. Asimismo, las matrices de propagación están dadas por,

$$P_l = \begin{cases} \begin{pmatrix} e^{-ik_x(x_{l+1}-x_l)} & 0 \\ 0 & e^{ik_x(x_{l+1}-x_l)} \end{pmatrix} & \text{para la región } k, \\ \\ \begin{pmatrix} e^{-iq_x(x_{l+1}-x_l)} & 0 \\ 0 & e^{iq_x(x_{l+1}-x_l)} \end{pmatrix} & \text{para la región } q, \end{cases} \quad l = 0, 1, 2, \dots, N. \quad (1.50)$$

Considerando la matriz de transferencia  $M$  como:

$$M = D_0^{-1} \left[ \prod_{l=1}^N D_l P_l D_l^{-1} \right] D_0, \quad (1.51)$$

resulta que,

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{N+1} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.52)$$

Una vez definida la matriz de transferencia, podemos derivar la transmitancia en términos del elemento de matriz  $M_{11}$ ,

$$T = \frac{1}{|M_{11}|^2}. \quad (1.53)$$

#### 1.4.4. Esquema de estados acotados

Con el fin de llevar a cabo un estudio más amplio acerca de la dinámica de los electrones de Dirac en sistemas basados a grafeno se pretende introducir al lector en el tema de estados acotados. En este sentido, un estado acotado describe un sistema en el que una partícula está sujeta a un potencial tal que la partícula manifiesta una tendencia a permanecer localizada en una o más regiones del espacio.

Con esto en mente, el espectro de energía de los estados acotados se puede calcular con solo cambiar de condiciones a la frontera blandas a condiciones a la frontera duras, es decir, se exige que el ancho de la primera y última barrera se extienda hasta el infinito, garantizando así el confinamiento de las partículas. Para estimar las energías de los estados acotados se utiliza el método de la matriz de transferencia, cuyas soluciones vienen dadas a través de la ecuación trascendente entre la energía y el vector de onda transversal,

$$M_{11}^{BS}(E, k_y; q_x \rightarrow i\alpha_x) = 0, \quad (1.54)$$

donde  $q_x$  se refiere al vector de onda a lo largo de la dirección espacial  $x$ , definido por medio de la ec. (1.3) y ec. (1.11). Asimismo, el elemento matricial  $M_{11}^{BS}$  se define en términos de la expresión,

$$M_{11}^{BS} = D_1^{-1} \left[ \prod_{l=2}^{N-2} D_l P_l D_l^{-1} \right] D_1. \quad (1.55)$$

Es importante señalar que el superíndice “BS” hace referencia a la situación de condiciones a la frontera duras (estados acotados) y no al caso de condiciones a la frontera blandas.

### 1.4.5. Transporte: conductancia

Una herramienta útil para la descripción del transporte electrónico en esta clase de sistemas es sin duda alguna la teoría de Landauer-Büttiker [46]. Esta teoría emplea la denominada función de transmisión, por medio de la cual se puede analizar y describir el flujo de corriente a través del sistema. Por lo tanto, aplicando y ajustando la fórmula de Landauer-Büttiker para el caso del grafeno, resulta que la conductancia en el régimen lineal se define por medio de la expresión,

$$G/G_0 = E_F^* \int_{-\pi/2}^{\pi/2} T(E_F^*, \theta) \cos \theta d\theta, \quad (1.56)$$

donde  $E_F^* = E_F/E_0$  es la energía de Fermi adimensional de los portadores de carga en el grafeno,  $G_0 = 2e^2 L_y E_0 / h^2 v_F$  es el factor de conductancia fundamental con  $L_y$  el ancho del sistema en la coordenada transversal  $y$  y  $\theta$  es el ángulo de incidencia de los electrones con respecto a la coordenada  $x$  y  $E_0 = V_0 = t'$ .

## 1.5. Resultados

En esta sección presentamos nuestros primeros resultados numéricos acerca de las propiedades de la transmitancia, conductancia y estructura de niveles de los electrones de Dirac en nuestros sistemas de estudio. Como ya se mencionó anteriormente, la secuencia del conjunto Cantor es utilizada para obtener la distribución de las barreras. En esta dirección, se abordan los casos de ECGSs y SCGSs para indagar cómo las características

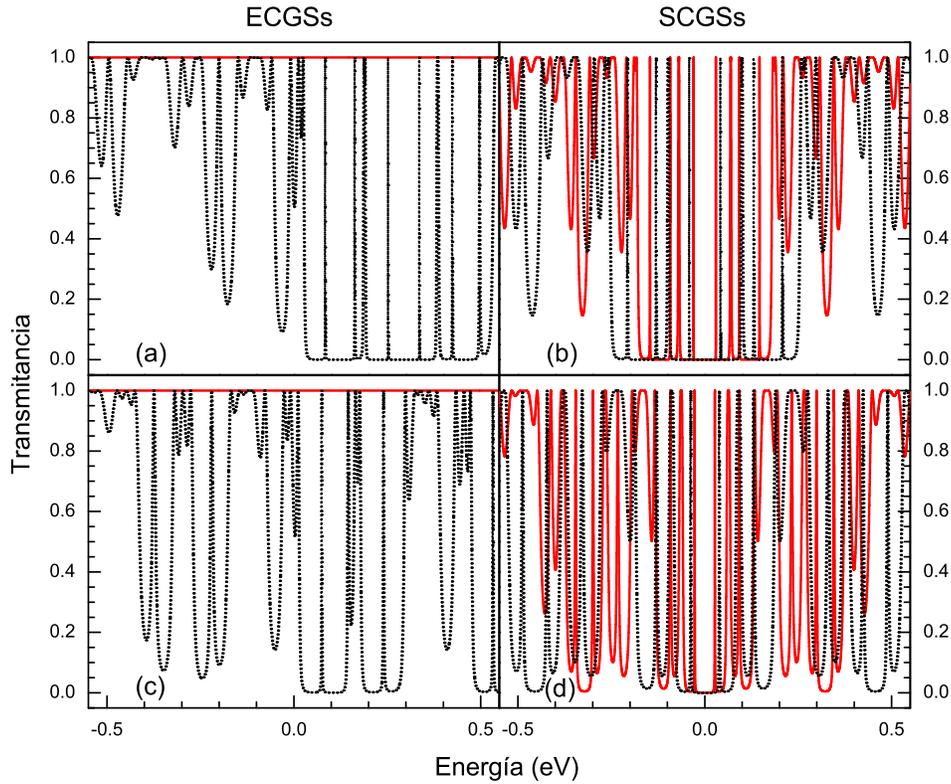


Figura 1.6: Transmitancia para diferentes números de generación del conjunto Cantor como función de la energía para ECGSs (columna izquierda) y SCGSs (columna derecha). El primer renglón ((a) y (b)) corresponden a la generación  $N = 3$ , mientras que el segundo renglón ((c) y (d)) a  $N = 4$ . La línea sólida roja y la punteada negra indican electrones de Dirac a incidencia normal  $\theta = 0$  y oblicua  $\theta = \pi/4$ , respectivamente. El ancho de partida y la altura de las barreras son  $w = 540a$  y  $E_0 = 0.13$  meV.

geométricas de la secuencia tipo Cantor impactan de alguna manera en las propiedades de tunelamiento de los portadores de carga bajo estas estructuras de potenciales aperiódicos.

La Fig. 1.6 muestra la evolución de la transmitancia para los sistemas ECGSs y SCGSs como función de la energía incidente del electrón para diferentes números de generación. En la Fig. 1.6 (a) y (c) se ilustran los espectros de transmitancia para ECGSs y en la Fig. 1.6 (b) y (d) los correspondientes a SCGSs. Con el objetivo de analizar los efectos al variar la generación se tomó en cuenta la generación  $N = 3$  (Fig. 1.6 (a) y (b)) y  $N = 4$  (Fig. 1.6 (c) y (d)). Además, se consideran otros parámetros fundamentales como el ancho de partida  $w = 540a$ , ancho asociado a la longitud del segmento inicial o en

otras palabras a el ancho de la primer barrera ( $N = 1$ ). Otro parámetro es la altura de las barreras de potencial, la cual toma el valor de 130 meV para ambos sistemas. En primera instancia, se estudia el tunelamiento de los electrones de Dirac a incidencia normal ( $\theta = 0$ ) representada por la línea sólida roja. En las curvas se puede observar una perfecta transmisión en ECGSs para cualquier número de generación, donde las estructuras resultan ser transparentes para electrones, debido a la conservación de pseudo-espín o tunelamiento Klein que está presente en barreras electrostáticas en grafeno. En contraste, es evidente la carencia del tunelamiento Klein en los espectros de transmisión referentes a SCGSs. En este caso las características de los espectros son similares a aquellos presentados para incidencia oblicua. En este sentido, surgen ventanas de transmisión y brechas prohibidas (gaps) en ambos sistemas, ECGSs y SCGSs, cuando se consideran electrones de Dirac a incidencia oblicua  $\theta = \pi/4$  (línea punteada negra). Estas características de transmisión se pueden asociar a las condiciones de una perfecta transmisión y reflexión de los electrones incidentes.

La conductancia como función de la energía de Fermi  $E_F$  se representa en la Fig. 1.7, donde se obtiene la evolución de esta propiedad de transporte para diferentes números de generaciones para ECGSs (primer renglón) y SCGSs (segundo renglón). Además, las Fig. 1.7 (b) y (d) pertenecen a ciertas regiones amplificadas de las Fig. 1.7 (a) y (c). Para ambos sistemas (ECGSs y SCGSs) los números de generación seleccionados son 3, 4, 5 y 6 indicados por la línea sólida negra, discontinua roja, punteada azul y discontinua-punteada verde, respectivamente. Como podemos observar, en todas las curvas referentes a ECGSs se manifiesta un comportamiento asimétrico con respecto a la energía. Para tener una mejor perspectiva de lo que sucede en la conductancia se amplificó la parte positiva del eje de la energía de las curvas correspondientes, Fig. 1.7 (b) y (d). De esta manera, se aprecia que las curvas crecen con el incremento del número de generación tanto para ECGSs como para SCGSs. En particular, la conductancia de los ECGSs se vuelve más suave cuando el número de generación aumenta, siendo casi lineal para  $N = 6$ , como se ilustra en la

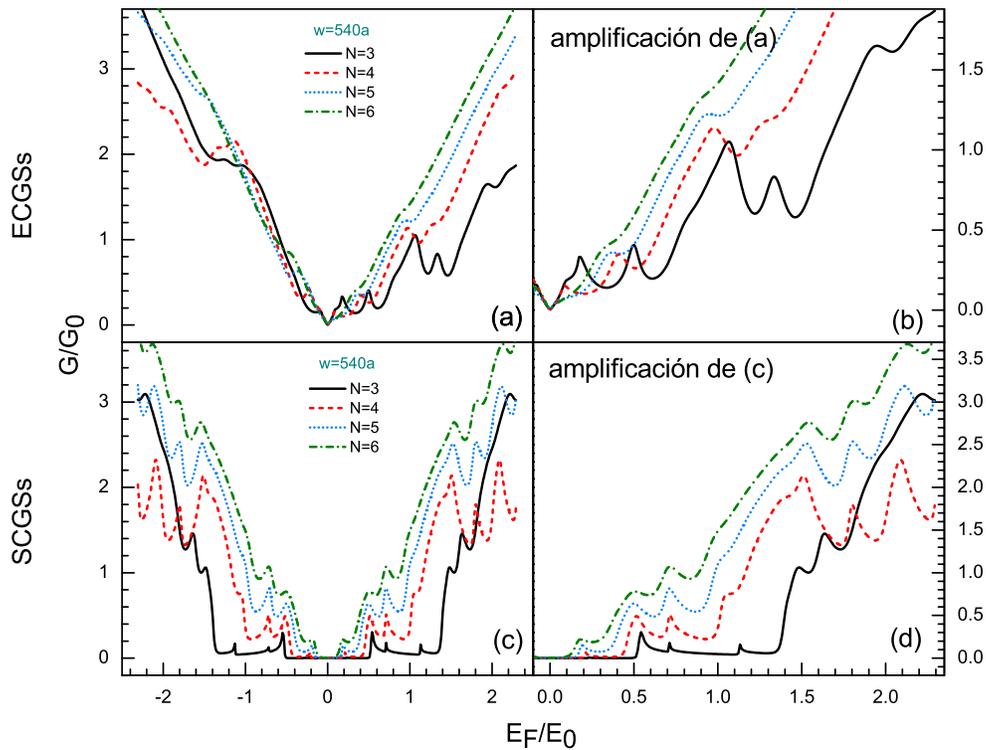


Figura 1.7: Conductancia para diferentes números de generación del conjunto Cantor como función de la energía de Fermi de los electrones de Dirac para (a) ECGSs y (c) SCGSs. (b) y (d) son ampliaciones de ciertas regiones de (a) y (c). La línea sólida negra, discontinua roja, punteada azul y discontinua-punteada verde corresponden a los números de generación  $N = 3, 4, 5$  y  $6$ , respectivamente. Los otros parámetros son los mismos que en la Fig. 1.6.

Fig. 1.7 (b). En otras palabras, podemos decir que el comportamiento oscilatorio tiende a ser menos visible, lo que se debe en parte a la disminución del ancho efectivo del sistema. Por el contrario, en el caso de SCGSs resultan curvas simétricas debido a la presencia de barreras tanto para electrones como para huecos, ver Fig. 1.7 (d). Otra característica interesante es la conservación del comportamiento oscilatorio entre generaciones, es decir, las envolventes de las curvas de conductancia son bastante similares solo que a escalas diferentes, véanse las generaciones 4, 5 y 6 en la Fig. 1.7 (d). Es importante mencionar que en estas curvas ( $N = 4, 5$  y  $6$ ) encontramos un dominio oscilatorio a bajas energías formado por tres picos, luego podemos ver un aumento en la conductancia seguido de

otro dominio oscilatorio con tres picos en el rango de energía altas. En particular, estos dominios permanecen aproximadamente en el mismo rango de energía a pesar del cambio de generación, ver Fig. 1.7 (d). Por lo tanto, podemos decir que la auto-similitud, propia de nuestro sistema aperiódico, de alguna manera se refleja en la conductancia.

Ahora, toca el turno de entender y describir las características oscilantes de la conductancia por medio de los estados acotados, debido a que muchos reportes no explican este comportamiento en absoluto. En este sentido, algunos de ellos afirman que el comportamiento oscilatorio se debe a las resonancias, estados cuasi-acotados y estados acotados, independientemente del mecanismo empleado para generar el sistema aperiódico en grafeno [25–27, 30–33, 37, 38, 40, 41]. A pesar de estos argumentos, es importante enfatizar que esos reportes nunca mencionaron cuáles de las resonancias son las responsables de los picos en las curvas de conductancia. Por lo tanto, para dar una solución viable a esta situación, proseguimos a calcular el espectro de estados acotados resolviendo numéricamente la ec. (1.54).

La Fig. 1.8 ilustra el espectro de los estados acotados como función del vector de onda transversal  $k_y$ , la columna de la izquierda corresponde a ECGSs mientras que la columna de la derecha a SCGSs. Las líneas punteadas rojas indican los límites para las regiones permitidas del espectro de estados acotados. La distribución de renglones y parámetros empleados son los mismos que en la Fig. 1.6. En los casos tratados aquí, ECGSs y SCGSs, se puede ver que para todas las generaciones aparece un agrupamiento de subbandas, cada agrupación consiste en la apertura de tres subbandas indicadas por las flechas rojas. Además, vale la pena señalar que el peculiar número tres del conjunto Cantor triádico [7] se refleja en esta clase de agrupamientos. Más aún, las flechas verdes representan subbandas que emergen en todos los espectros independientemente de la generación y el mecanismo seleccionado. Este resultado es una consecuencia de la estructura triádica de Cantor, debido a que la parte central del ancho  $w/3$  de la segunda generación aparece en todas las generaciones posteriores. También, podemos identificar diferentes características

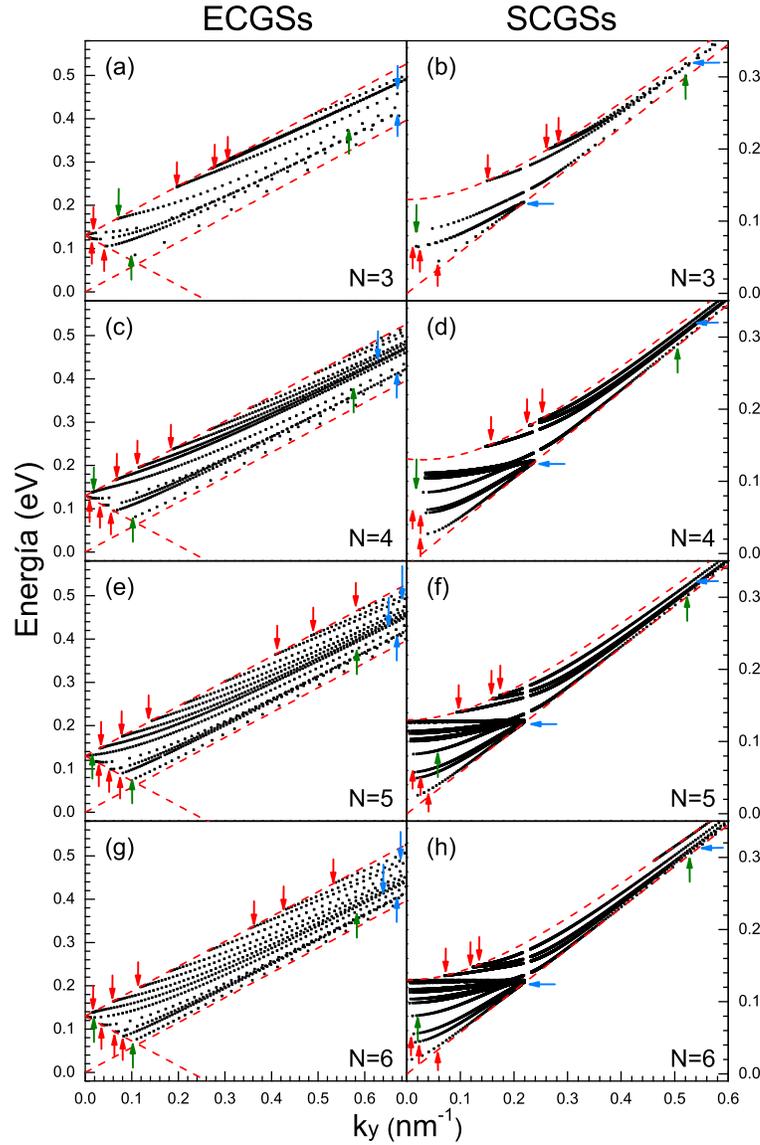


Figura 1.8: Espectro de estados acotados para diferentes números de generación del conjunto Cantor triádico como función del vector de onda  $k_y$  para ECGSs (columna izquierda) y SCGSs (columna derecha). El primer ((a) y (b)), segundo ((c) y (d)), tercer ((e) y (f)) y cuarto ((g) y (h)) renglón representan los números de generación  $N = 3, 4, 5$  y  $6$ , respectivamente. Las flechas en color rojo, azul y verde indican el inicio y final, la degeneración y oclusión, y el aislamiento (carece de un agrupamiento, incluso cuando el número de generación aumenta) de las subbandas, respectivamente.

de las subbandas dependiendo del sistema, ECGSs o SCGSs. Por ejemplo, la degeneración (unión de dos o más subbandas) ocurre cuando el vector de onda aumenta para ECGSs y SCGSs, en ambos casos dicha degeneración está representada por flechas azules. Sin

embargo, en el caso de los SCGSs, las subbandas también están ocluidas (flechas azules), aproximadamente a la altura de la barrera cerca de los 0.13 eV, ver Fig. 1.8 (b), (d), (f) y (h). Por lo tanto, podemos mostrar la relación entre el espectro de los estados acotados y los picos de las curvas de conductancia teniendo en cuenta la dinámica de apertura, degeneración y oclusión de las subbandas de energía [47–49]. Específicamente, considerando el espectro de estados acotados del caso SCGSs se pueden ver tres regiones sobresalientes: la primera de ellas consta de tres subbandas agrupadas (flechas rojas) por debajo de la altura de la barrera (bajas energías), la segunda se caracteriza por la degeneración y cierre de las subbandas (flechas azules) y, la tercera con tres subbandas agrupadas (flechas rojas) por encima de la altura de la barrera (altas energías).

Finalmente, si observamos otra vez a detalle las curvas de conductancia correspondientes a SCGSs, Fig. 1.7 (d), también podemos identificar tres regiones que coinciden con las de la columna derecha de la Fig. 1.8. Estas regiones se manifiestan con tres picos a baja energía, seguidas de un aumento en la conductancia y por último, tres picos a alta energía. Para completar la comprensión de esta correlación, vale la pena mencionar que cuando las subbandas se abren, la conductancia disminuye y el efecto contrario ocurre cuando las subbandas se degeneran y ocluyen [50]. Como observación final, queremos decir que la única diferencia entre ECGSs y SCGSs es la conservación y la no conservación del pseudo-espín, respectivamente. Por lo tanto, presumiblemente el tunelamiento Klein y el efecto de colimación, que son una consecuencia directa de la conservación de pseudo-espín, esconden características auto-similares en el caso de ECGSs.

## 1.6. Conclusiones

En general, hemos implementado el método de la matriz de transferencia y el formalismo de Landauer-Büttiker para estudiar la transmitancia, conductancia y estructura de niveles en sistemas aperiódicos basado a grafeno. En particular, se utilizó la secuencia de

Cantor para generar el arreglo cuasi-regular de barreras y pozos de potencial. En este trabajo nos enfocamos en dos tipos de sistemas aperiódicos: el primero sobre barreras generadas por medio de sustratos nano-estructurados y el segundo de barreras creadas a través de campo electrostático. Con respecto a la transmitancia se obtuvo que el tunelamiento Klein y el efecto de colimación predominan sobre el caso electrostático. Las curvas de conductancia, para el último caso mencionado, presentan un comportamiento asimétrico y además, muestran una tendencia lineal a medida que el número de generación aumenta, esto para valores de energías positivas. Por el contrario, en el caso de sustratos las curvas de conductancia exhiben rasgos simétricos y auto-similares en función del número de la generación. Adicionalmente, se calculó y analizó el espectro de los estados acotados con la finalidad de entender el comportamiento oscilatorio de la conductancia. Con base a nuestros resultados se obtiene un agrupamiento de tres subbandas que se generan en el caso electrostático y se ocluyen-degeneran en el caso de sustratos. Además, estas subbandas describen, a través de su apertura y apertura-cierre, la forma y localización de los picos de conductancia. Por último, es importante mencionar que las características geométricas de las estructuras aperiódicas tipo Cantor se manifiestan en las propiedades de la transmitancia, conductancia y estructura electrónica.



---

### Reglas de escala en sistemas aperiódicos

---

#### 2.1. Introducción

Una vez estudiadas las propiedades de transmisión y transporte en ECGSs y SCGSs toca el turno de investigar las propiedades de auto-similitud y escalamiento en ambos sistemas. En este capítulo se abordará la noción de auto-similitud con el objetivo de que el lector conozca los conceptos básicos, para después mostrar un análisis sobre los rasgos auto-similares en las propiedades de transmisión en sistemas aperiódicos basados a grafeno. Además, se presentará una serie de expresiones matemáticas que describen bastante bien el escalamiento de los espectros de transmisión.

##### 2.1.1. Auto-similitud

En la última década, la modulación aperiódica ha atraído gran interés debido a sus peculiares propiedades electrónicas y optoelectrónicas [4, 5], tales como las propiedades

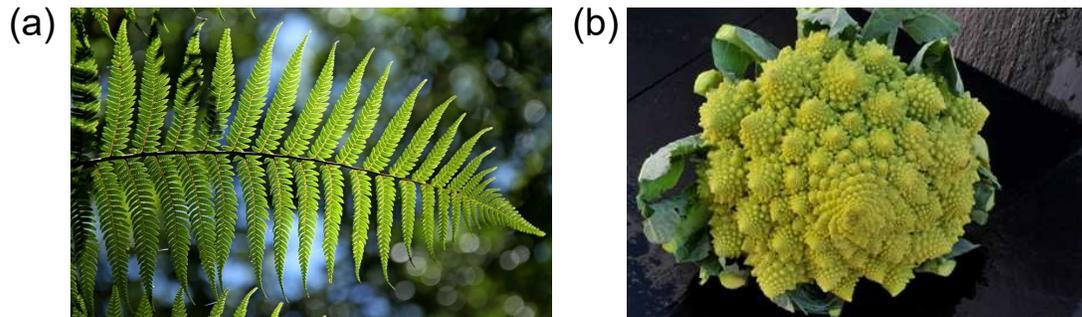


Figura 2.1: Auto-similitud en la naturaleza: (a) helechos y (b) brécol romanesco.

de transmisión que aparecen altamente fragmentadas mostrando patrones auto-similares junto con un espectro electrónico tipo fractal [6], diferente a lo que ocurre en un sistema periódico (superred). Todas estas características son consecuencia directa de la cuasi-periodicidad que subyace en esta clase de estructuras aperiódicas.

Los sistemas cuasi-periódicos o aperiódicos son estructuras que pueden ser consideradas como fractales [7], objetos geométricos homogéneos y auto-similares, que a su vez se pueden definir como estructuras ordenadas pero sin poseer periodicidad. En este contexto, las estructuras aperiódicas o también conocidas comúnmente como medios determinísticos se clasifican en dos grandes grupos dependiendo del algoritmo de construcción. Aquellos generados por medio de un procedimiento substitucional denominado como secuencias de substitución (Fibonacci, Thue-Morse, Double-Period, Rudin-Shapiro y Silver-Mean) y aquellos generados de forma similar a los conjuntos fractales [7], nombrados como estructuras fractales (conjuntos de Cantor y fractales de Koch). Entre las características peculiares de las estructuras cuasi-periódicas sobresale la llamada auto-similitud [6]. Esta propiedad significa que una o más partes de una estructura u objeto tienen exactamente o aproximadamente la misma forma del objeto entero, incluso si estas partes se amplifican a diferentes escalas, el resultado será el objeto completo.

La auto-similitud se encuentra en todas partes, desde procesos naturales estadísticos, estructuras geográficas hasta redes complejas [7]. En términos de escalas de longitud,

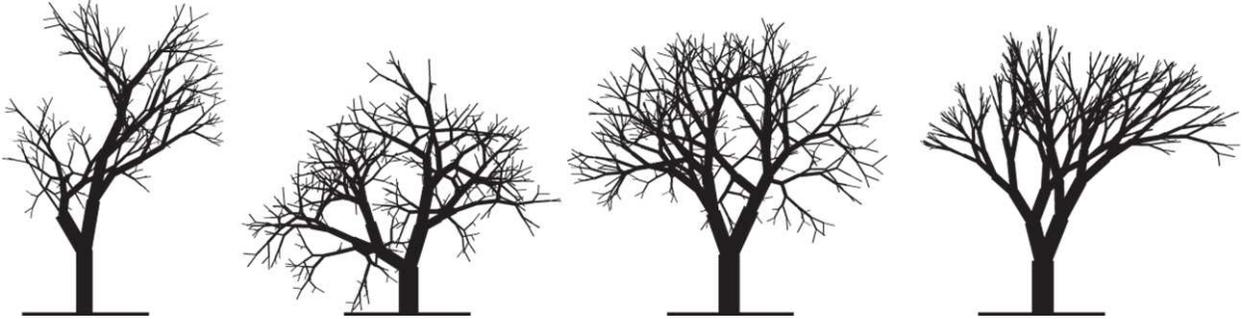


Figura 2.2: Auto-similitud en el esqueleto de los árboles.

podemos decir que la auto-similaridad se encuentra en sistemas del tamaño del átomo a sistemas del tamaño del universo [7].

Con respecto a procesos naturales, esta propiedad se puede observar en diversos aspectos de la naturaleza. El ejemplo más clásico lo podemos observar en las primeras plantas de nuestro planeta: los helechos, donde sus ramificaciones manifiestan una auto-similitud casi perfecta, Fig. 2.1 (a). Otro de los ejemplos más atractivos es el caso del brécol romano que presenta esta clase de propiedad, como consecuencia de la geometría fractal que posee su estructura, Fig. 2.1 (b). La forma que adquieren estos tipos de vegetación se debe en principio a un método de crecimiento simple y repetitivo dando origen a estructuras complejas. El diseño de las ramificaciones está definido por el código genético de las plantas, este código se encarga de dar la misma orden a la rama principal como a una secundaria: crece y bifúrcate creando una replica de ti misma en cada ramificación. Por lo tanto, podemos encontrar una gran diversidad de formas fractales en diferentes plantas así como en árboles.

En el caso de los árboles la auto-similitud está presente en sus esqueletos, tal y como se aprecia en la Fig. 2.2. Este diseño logra disminuir la tensión o el estrés generado por los fuertes vientos evitando así que los árboles sean derribados [51]. Es importante mencionar que esta configuración auto-similar en las plantas les proporciona un mecanismo capaz de captar una cantidad mayor de luz,  $\text{CO}_2$  y oxígeno posible.



Figura 2.3: Auto-similitud en (a) montañas, (b) costas y (c) relámpagos.

Por otro lado, es posible encontrar auto-similitud en estructuras geográficas, como por ejemplo, en el terreno y la geología. Específicamente, se puede apreciar esta propiedad en las montañas (Fig. 2.3 (a)), solo que ahora causada por la erosión de la lluvia, el viento, la fractura de las rocas por los cambios de temperatura y las presiones y movimientos sísmicos que crean la cordillera rocosa en la que se ubica la montaña. Las desembocaduras de los ríos, las costas (Fig. 2.3 (b)) y los relámpagos (Fig. 2.3 (c)) son también casos donde puede suceder esta geometría fractal [7]. Adicionalmente, la distribución y abundancia de las especies se deriva bajo la influencia de la auto-similitud [52].

Dentro de la complejidad en la que el cuerpo humano subyace, se pueden encontrar una gran cantidad de ejemplos sorprendentes que poseen una geometría fractal y, como consecuencia, desarrollan un patrón de auto-similitud en su estructura, ver Fig. 2.4. En este caso el sistema nervioso, cardiovascular, las venas y arterias, los alvéolos pulmonares y los bronquios son ejemplos de partes del cuerpo generados por medio de un proceso de formación basado en la ramificación y bifurcación. Gracias a este proceso el sistema nervioso, las venas y arterias (Fig. 2.4 (a)) garantizan alimentar y cubrir a la mayor cantidad posible de células asegurando que la presión sanguínea sea la misma en cada una de las ramificaciones. Asimismo, la estructura fractal de los alvéolos y bronquios (Fig. 2.4 (b)) proporciona en cada respiración un máximo rendimiento en el intercambio de  $\text{CO}_2$  y oxígeno. Otro aspecto interesante es el funcionamiento del corazón (Fig. 2.4 (c)), ya que desde hace tiempo se creía que un ritmo cardíaco periódico o regular era signo de salud. Sin embargo, estudios recientes han encontrado que un corazón sano presenta un

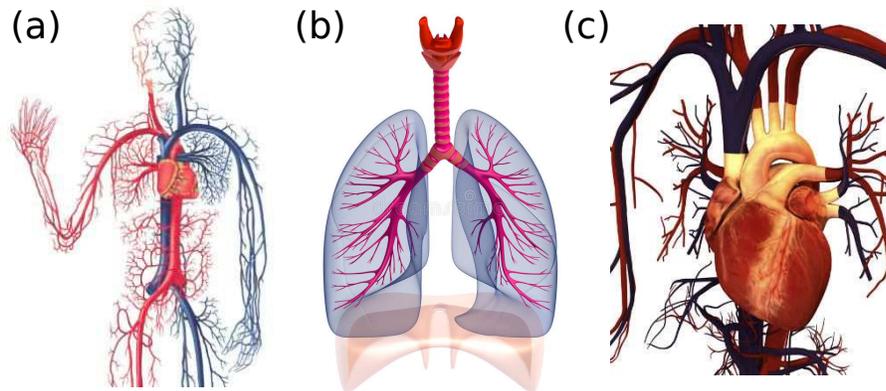


Figura 2.4: Auto-similitud en cuerpo humano: (a) sistema cardiovascular, (b) alvéolos pulmonares y (c) en el ritmo cardíaco.

ritmo que tiende a ser caótico y, por el contrario, los latidos repetitivos y periódicos son un signo de enfermedad [53]. La razón de estos argumentos se debe a que un corazón sano tiene la capacidad de adaptarse y cambiar en diversas situaciones su ritmo cardíaco compensado así la necesidad del organismo. Mientras que un corazón enfermo carece de esa capacidad presentado una pauta regular y, como consecuencia, acaba degenerando los tejidos produciendo un fallo en el sistema.

Desde el punto de vista tecnológico, se ha explotado la auto-similitud con la finalidad de desarrollar dispositivos electrónicos capaces de cubrir un mayor número de necesidades, tal es el caso de las antenas fractales [54], véase Fig. 2.5. Antenas que se basan en la geometría fractal y que destacan por su tamaño compacto, y por la capacidad de recibir un amplio rango de frecuencias, es decir, poseen un comportamiento multibanda, optimizando de esta manera el espacio del dispositivo (radio, celulares, teléfonos, etc.). Estas cualidades son el motivo principal por el cual las antenas fractales son idóneas para su uso en telecomunicaciones, en contraste con las antenas tradicionales.

En este contexto, todas aquellas partes auto-similares de diferentes tamaños que componen una estructura o sistema pueden ser reproducidas a diferentes escalas conservando la semejanza del objeto completo. Por lo tanto, es natural suponer que existen reglas o fac-

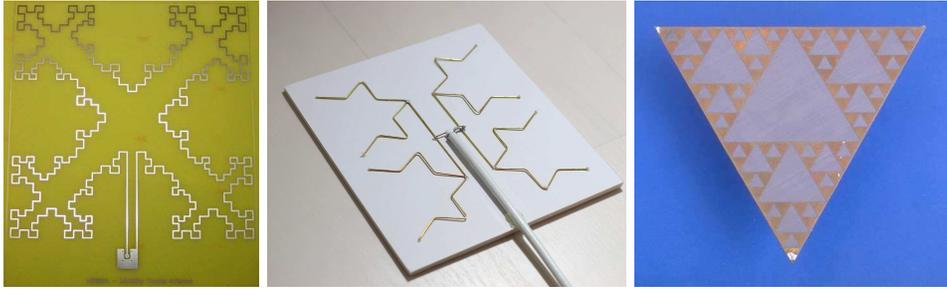


Figura 2.5: Auto-similitud en antenas fractales.

tores de escala que relacionan la escalabilidad de estas partes. Sin embargo, en la mayoría de los múltiples reportes que podemos encontrar en la literatura sobre sistemas de estado sólido, la auto-similaridad se deja como una cuestión de percepción visual, y raramente se informan las reglas de escalado [55].

En este sentido, desde el descubrimiento del grafeno [8–10] los investigadores han comenzado a tratar con estructuras aperiódicas basado en este material prominente [25–40, 42, 43]. Con respecto al conjunto Cantor, unos pocos trabajos han sido enfocados en la misma dirección [37–39]. A pesar de las particularidades de estos informes, podemos ver que tienen un aspecto común, una estructura cuasi-periódica con propiedades auto-similares, que se manifiestan en los espectros de transmisión. Sin embargo, las reglas de escala de los patrones auto-similares no se reportan, y una vez más la auto-similitud se considera como una cuestión de percepción visual. Por lo tanto, surge una pregunta simple, ¿cuáles son las reglas de escala apropiadas capaces de reproducir los patrones auto-similares?

Siguiendo las líneas de un trabajo previo [56], se mostrará en este capítulo las reglas de escala de los patrones de transmisión auto-similares de las estructuras de grafeno tipo Cantor (CGSs). En este caso, las CGSs se construyen simplemente escalando (espacialmente) las barreras del sistema de acuerdo con las reglas establecidas por la secuencia del conjunto Cantor triádico. En particular, se obtienen reglas de escala entre generaciones, longitudes del sistema y alturas de las barreras. Estas propiedades de escala son válidas tanto para incidencia normal como oblicua. También llevamos a cabo un análisis

comparativo de las expresiones de escala en CGSs basadas en sustratos (SCGSs), CGSs bajo los efectos de campo electrostático (ECGSs) y en estructuras semiconductoras (SSs) compuestas por  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ , encontrando un mejor escalamiento para el caso de SCGS. Nuestros resultados indican que condiciones como la no simetría (especialmente hablando) y la escala en el eje de la energía de la estructura no son necesarias para obtener la auto-similitud en la transmitancia [56]. Por lo tanto, hasta donde podemos ver, las condiciones para obtener la auto-similitud en las propiedades de transmisión son: electrones de Dirac, una estructura auto-similar y la no conservación del pseudo-espín (electrones en SCGSs).

## 2.2. Motivación

En los últimos años los materiales bidimensionales han tomado un gran impulso en el ámbito de la investigación científica entre los que destaca el alótropo 2D del carbono mejor conocido como grafeno. Una investigación demuestra que en el grafeno es posible inducir fases aislantes y fases superconductoras bajo ciertas circunstancias siempre y cuando ocurra una ruptura de algunas de sus simetrías quirales [57], lo cual lo convierte en un material más atractivo de lo que ya es. Por lo tanto, es posible obtener propiedades exóticas al romper ciertas simetrías que de algún otro modo no serían observables.

## 2.3. Objetivos

El objetivo principal, relacionado con este segundo capítulo, es investigar rasgos de auto-similitud en las propiedades de transmisión de los electrones de Dirac a través de estructuras de grafeno tipo Cantor, CGSs. En esta ocasión se pretende hacer un análisis comparativo entre tres estructuras distintas. Las dos primeras son prácticamente las dos estructuras del capítulo anterior, es decir, SCGSs y ECGSs. Mientras que la tercera hace

referencia a una estructura semiconductor típica (SSs). Con esto en mente fijaremos los siguientes puntos:

- Buscar patrones auto-similares en los espectros de transmisión en cada uno de los tres sistemas propuestos: SCGSs, ECGSs y SSs, en función de la variación de cada uno de los parámetros fundamentales. Dichos parámetros corresponden al número de generación  $N$ , altura de las barreras  $V_0$  y longitud del sistema  $w$ .
- Implementar y proponer reglas de escala bien definidas que relacionen la auto-similitud de los espectros de transmisión con respecto a los tres parámetros fundamentales.

## 2.4. Metodología

Como ya se mencionó en la sección anterior existen varios mecanismos que permiten generar barreras de potencial en el grafeno, de tal manera que es posible desarrollar una distribución tipo fractal de barreras según las reglas de sustitución seleccionadas, que en esta ocasión serán las reglas del conjunto Cantor. Para ilustrar esta idea véase Fig. 1.3 y Fig.1.4. Además, como se dijo al inicio de este capítulo nuestro propósito se basa en estudiar las propiedades de auto-similitud en los espectros de transmisión, por lo que el método de la matriz de transferencia es suficiente para cumplir con dicho propósito.

### 2.4.1. Barreras para estructuras semiconductoras

Con la finalidad de comparar el comportamiento de diferentes tipos de portadoras de carga en estructuras tipo Cantor, se toman en cuenta en este estudio electrones de Dirac masivos y no masivos, junto con electrones de Schrödinger. Como uno de nuestros objetivos centrales es estudiar estructuras fractales en grafeno, es importante tener en cuenta las herramientas que permitan establecer la dinámica en aquellas estructuras en las cuales

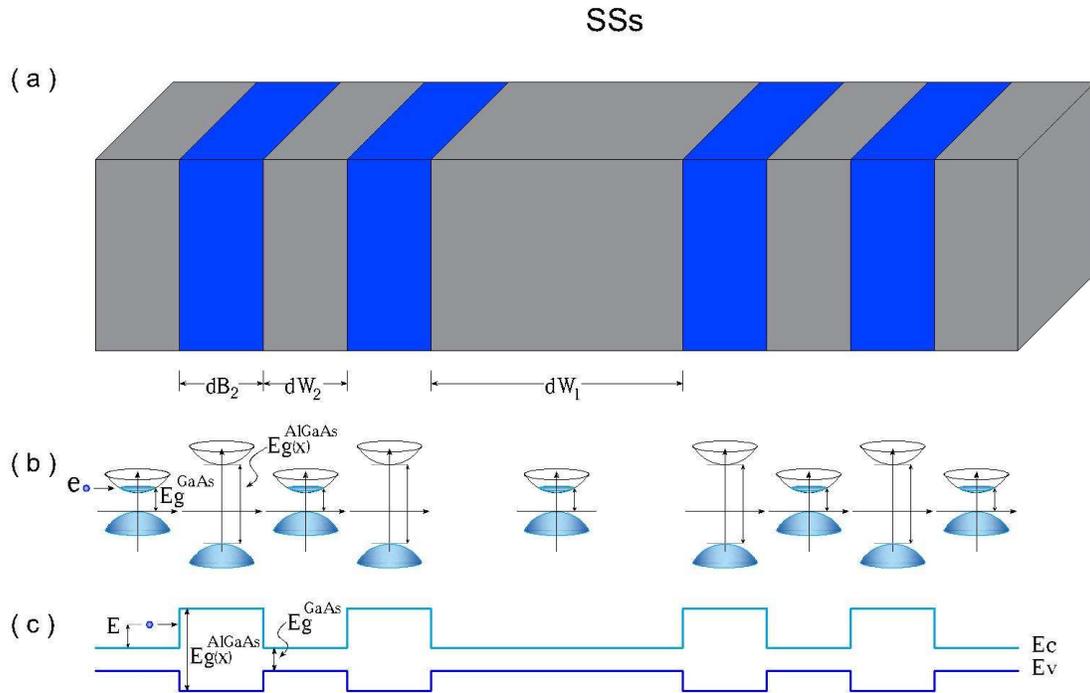


Figura 2.6: Representación gráfica de una típica estructura semiconductor (SSs) compuesta por  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ . (a) Representación de la sección transversal de SSs. Esta estructura puede crearse alternando semiconductores con bandas prohibidas diferentes, como GaAs (regiones grises) y AlGaAs (regiones azules). (b) Distribución de paraboloides tipo Dirac, el área llena de azul indica estados ocupados y la esfera azul describe un electrón de Schrödinger incidiendo con una energía de Fermi. (c) Perfil de borde de banda de SSs. Las líneas en color cian y azul corresponden a electrones y huecos, respectivamente. La altura de las barreras está modulada por la concentración de aluminio ( $x$ ). Todas las ilustraciones se presentan para el número de generación  $N = 3$  del conjunto Cantor.

las barreras son generadas por medio de sustratos nano-estructurados (Fig. 1.3) y campo electrostático (Fig. 1.4), herramientas que ya se definieron en el capítulo anterior por lo que ya no serán descritas. Por otro lado, los fundamentos de los electrones de Schrödinger se pueden encontrar en otra parte [58], y algunos detalles menores se pueden ver en la Fig. 2.6.

## 2.5. Resultados

Primero que nada, es importante enfatizar que el objetivo de nuestro trabajo es descubrir las propiedades de escalamiento en los espectros de transmisión para tres parámetros fundamentales: la generación  $N$ , la altura de las barreras  $V_0$  y la longitud del sistema  $w$ . Por lo tanto, estudiamos la auto-similitud y la escalabilidad de los espectros de transmisión de SCGSs (Fig. 1.3), ECGSs (Fig. 1.4) y una típica SSs (Fig. 2.6). En lo sucesivo, enfocaremos nuestra atención en tres expresiones matemáticas especiales que pueden describir la escalabilidad de nuestros sistemas.

Antes de continuar con la presentación de nuestros resultados numéricos, nos detendremos a presentar aspectos importantes de los sistemas de interés: SCGSs, ECGSs y SSs. En el caso de las SCGSs, los portadores de carga son tratados como partículas relativistas mejor conocidas como electrones de Dirac masivos. Otra característica es que el efecto Klein está ausente debido a la no conservación del pseudo-espín. En el caso de las ECGSs, los portadores de carga son electrones de Dirac sin masa. En este caso, a incidencia normal se manifiesta el efecto Klein, es decir, ocurre una transmisión perfecta. En este punto, es importante mencionar que nuestros resultados para electrones de Dirac sin masa a incidencia normal no son ilustrativos, en vista del hecho de que la transmitancia es siempre  $T = 1$ , independientemente de la generación, altura y longitud del sistema, y por ende las reglas de escala siempre serán válidas. Por lo tanto, no se presentarán los resultados de los electrones de Dirac sin masa a incidencia normal. En el caso de las SSs, los portadores de carga son electrones de Schrödinger. Una característica importante en este caso es que el movimiento transversal de los electrones de Schrödinger es separable, por lo que las propiedades de transmisión no dependen del ángulo de incidencia. Por lo tanto, solo presentaremos los resultados de los electrones Schrödinger a incidencia normal.

Para analizar las reglas de escala de los espectros de transmisión entre generaciones, proponemos una expresión que depende del factor tres, que está involucrado cuando cambia

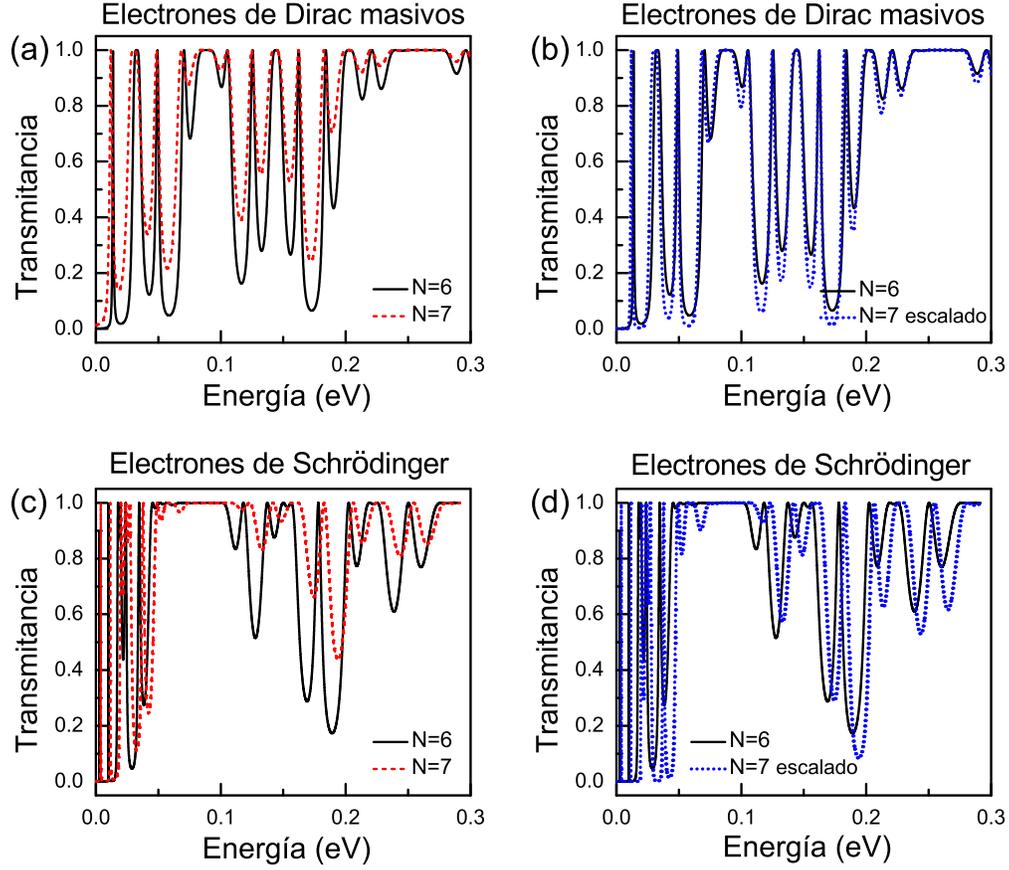


Figura 2.7: Escalamiento entre generaciones a incidencia normal para SCGSs (primer renglón) y SSs (segundo renglón). (a) Comparación de la transmitancia como función de la energía para las generaciones  $N = 6$  (líneas continuas negras) y  $N = 7$  (líneas discontinuas rojas). (b) Usando la ecuación de escalamiento apropiada (ec. (2.1)), podemos corroborar que las curvas de referencia ( $N = 6$ ) y escalada ( $N = 7$ ) son aproximadamente las mismas, líneas sólidas en negro y líneas punteadas en azules, respectivamente. (c) y (d) corresponden a la misma comparación que en (a) y (b) pero para SSs, o equivalentemente a electrones de Schrödinger. En este caso, la escalabilidad no está presente. Los parámetros estructurales de ambos sistemas SCGSs y SSs son  $w = 1000a$  y  $V_0 = 0.13$  eV.

la generación en el conjunto Cantor triádico. Específicamente, la expresión viene como:

$$T_N(E) \approx [T_{N+1}(E)]^3. \quad (2.1)$$

Ahora, implementamos esta expresión para los electrones de Dirac masivos y los electrones de Schrödinger a incidencia normal, véase la Fig. 2.7. Los parámetros estructurales

para ambos sistemas son los mismos, es decir, la altura y el ancho de las barreras así como la generación son las mismas. En particular, consideramos barreras de altura y ancho inicial de  $V_0 = 0.13$  eV y  $w = 1000a$ , respectivamente, con  $a = 1.42$  Å definida como la distancia carbono-carbono en grafeno, y las generaciones  $N = 6$  y  $N = 7$ . A partir de ahora,  $N = 6$  será la generación de referencia y  $N = 7$  la generación que se escalará o simplemente la generación escalada. En la Fig. 2.7 (a) mostramos la transmitancia como función de la energía para los electrones masivos de Dirac. Las curvas sólidas en color negro y las discontinuas en rojo corresponden a las generaciones 6 y 7, respectivamente. Como podemos ver las envolventes de estas curvas son bastante similares, la única diferencia que podemos notar es un cambio en el eje vertical. Apelando a esta similitud implementamos nuestra regla de escala (ec. (2.1)) para obtener el espectro de transmisión de la generación  $N = 6$  por medio de la generación escala  $N = 7$ , es decir,  $T_6(E) \approx [T_7(E)]^3$ . Como podemos ver en la Fig. 2.7 (b) la semejanza entre la generación de referencia ( $N = 6$ ) y la escala ( $N = 7$ ) es bastante buena, para ello basta con comparar la curva sólida negra con la curva punteada azul. En el caso de los electrones de Schrödinger los espectros de transmisión también reflejan semejanza entre las generaciones 6 y 7, consulte las curvas sólidas de color negro y las discontinuas en rojo en la Fig. 2.7 (c). Sin embargo, en este caso, además del desplazamiento ocurrido en el eje vertical, podemos ver otro desplazamiento entre las curvas con respecto al eje de energía. Y es precisamente esta diferencia la que hace que nuestra regla de escala no funcione bien en el caso de electrones de Schrödinger, véase la curva sólida en negro y la punteada en azul ilustradas en la Fig. 2.7 (d).

Las propiedades de escalamiento de los electrones de Dirac masivos y sin masa a incidencia oblicua ( $\theta = \pi/4$ ) se presentan en la Fig. 2.8. Estos casos están en contraposición, ya que en un caso se descarta la conservación del pseudo-espín (electrones de Dirac masivos), mientras que en el otro caso se mantiene la conservación (electrones de Dirac sin masa). Los parámetros estructurales son los mismos que en la Fig. 2.7. Para los electrones de Dirac masivos, una vez más, podemos ver que los espectros de transmisión entre las

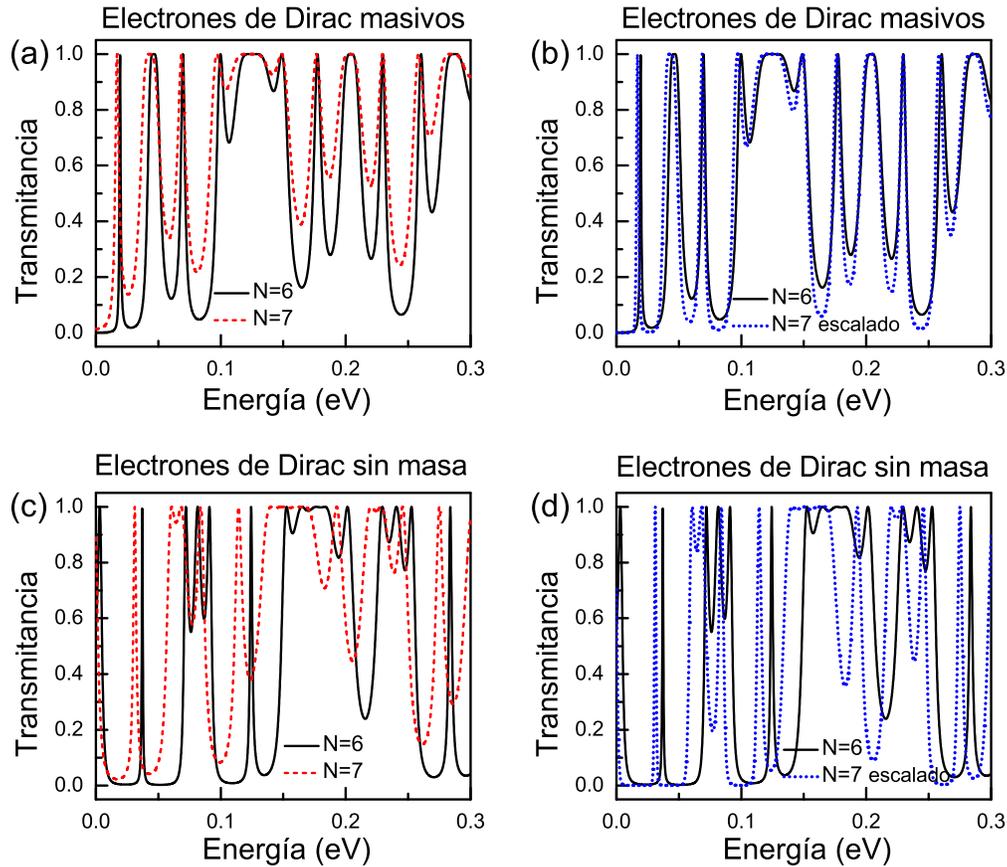


Figura 2.8: Escalamiento entre generaciones a incidencia oblicua ( $\theta = \pi/4$ ) para SCGSs (primer renglón) y ECGSs (segundo renglón). (a) Comparación de la transmitancia como función de la energía para generaciones  $N = 6$  (líneas continuas negras) y  $N = 7$  (líneas discontinuas rojas). (b) Usando la ecuación de escalado apropiada (ec. (2.1)), podemos corroborar que las curvas de referencia ( $N = 6$ ) y escalada ( $N = 7$ ) son aproximadamente las mismas, indicadas por las líneas sólidas negras y líneas punteadas azules, respectivamente. (c) y (d) corresponden a la misma comparación que en (a) y (b) pero para ECGSs, o equivalentemente a electrones de Dirac sin masa. En este caso, las propiedades de escalamiento no son visibles. Los parámetros estructurales son los mismos que en la Fig. 2.7.

generaciones 6 y 7 son bastante similares, la principal diferencia es un desplazamiento relativo en el eje de transmisión, ver la Fig. 2.8 (a). Aplicando nuestra regla de escala a  $T_7(E)$ , obtenemos una muy buena correspondencia con respecto al espectro de transmisión de referencia ( $T_6(E)$ ), comparamos la curva sólida de color negro y la punteada en azul en la Fig. 2.8 (b). Las principales diferencias entre estas curvas se localizan en los mínimos de la transmitancia. En el caso de los electrones de Dirac sin masa, podemos observar que las

propiedades de escalamiento empeoran en comparación con el caso masivo, ver la Fig. 2.8 (d). Incluso, este caso es peor con respecto al caso de electrones de Schrödinger, compare las Figs. 2.7 (d) y 2.8 (d). Estas diferencias significativas entre el espectro de referencia y el escalado proviene de los grandes cambios en los ejes de transmitancia y energía entre  $T_6(E)$  y  $T_7(E)$ , ver Fig. 2.8 (c).

Continuando con nuestro estudio sobre CGSs, también hemos encontrado que los patrones auto-similares son visibles cuando se consideran dos sistemas que tienen diferente altura de las barreras. Por lo tanto, se examina la escalabilidad de SCGSs, ECGSs y SSs. Ahora, llega el turno de ver cómo las alturas de las barreras juegan un papel fundamental con respecto a las propiedades auto-similaridad de nuestras estructuras aperiódicas. En este sentido, se propone la siguiente expresión, en general, para analizar las propiedades de escalamiento entre sistemas que tienen diferentes alturas de las barreras o simplemente el escalamiento entre alturas [56],

$$T_{V_0}(E) \approx [T_{\frac{1}{k}V_0}(E)]^{k^2}, \quad (2.2)$$

donde el subíndice  $V_0$  indica la altura de las barreras, y  $k$  es un factor que viene en múltiplos de dos.

A este respecto, la Fig. 2.9 representa el escalamiento entre alturas a incidencia normal ( $\theta = 0$ ) tanto para los electrones de Dirac masivos como para los electrones de Schrödinger. En este caso, los parámetros estructurales son  $N = 6$  y  $w = 1000a$ . En primer lugar, mostramos comparativamente los espectros de transmisión para una estructura con dos alturas diferentes de las barreras. En particular, las Figs. 2.9 (a) y (c) corresponden a electrones de Dirac masivos y electrones de Schrödinger, respectivamente. Específicamente, el espectro de transmisión se calcula para una altura igual a  $V_0 = 0.10$  eV y  $V_0 = 0.05$  eV. Ambos espectros denotados por  $T_{0.10}(E)$  y  $T_{0.05}(E)$ , los cuales están indicados por la curva sólida de color negro y la discontinua en rojo, respectivamente. Entonces, si implementamos

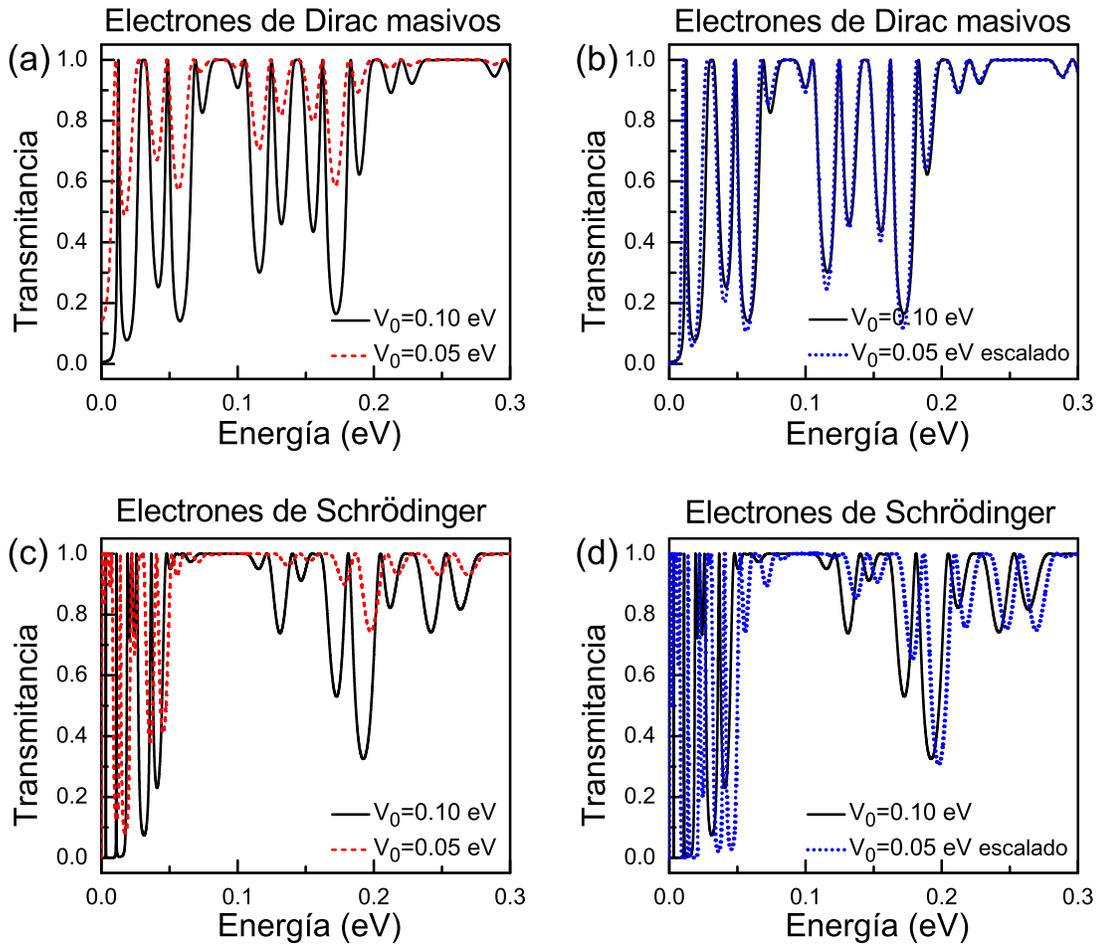


Figura 2.9: Escalamiento entre las alturas de las barreras a incidencia normal para SCGSs (primer renglón) y SSs (segundo renglón). (a) Comparación de la transmitancia como función de la energía para las alturas  $V_0 = 0.10$  eV (líneas continuas negras) y  $V_0 = 0.05$  eV (líneas discontinuas rojas). (b) Al implementar la ecuación de escala apropiada (ec. (2.2)), podemos ver que la curva escalada correspondiente a  $V_0 = 0.05$  eV es prácticamente similar a la de referencia  $V_0 = 0.10$  eV, líneas punteadas en azul y sólidas en negro, respectivamente. (c) y (d) corresponden a la misma comparación que en (a) y (b), pero para SSs. En este caso, la escalabilidad no está presente. Los parámetros estructurales para ambos sistemas, SCGSs y SSs, son  $w = 1000a$  y  $N = 6$ .

la regla de escala (ec. (2.2)) para estas alturas, es decir,  $T_{0.10}(E) \approx [T_{0.05}(E)]^4$ , se obtiene un espectro de transmisión escalado para SCGSs (Fig. 2.9 (b)) y para SSs (Fig. 2.9 (d)). Si prestamos atención a los resultados de los electrones de Dirac masivos, podemos ver una gran correspondencia entre la transmisión de referencia y la transmisión escalada. Por lo tanto, podemos corroborar que la auto-similitud y la escalabilidad se manifiestan

en el caso de SCGSs, y aún más interesante, hemos encontrado una regla de escala que describe estas propiedades. Por otro lado, la Fig. 2.9 (d) muestra el escalamiento entre alturas para el caso de electrones de Schrödinger. La altura de las barreras para este sistema,  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ , se modula cambiando la concentración de aluminio ( $x$ ). Aquí, podemos ver que la transmisión de referencia y la transmisión escalada, líneas sólidas en negro y punteadas en azul, tienen envolventes desiguales, es decir, la regla de escala no se cumple en absoluto. Aún más, esta diferencia es fácil de visualizar en la figura mencionada porque la transmisión de referencia y la transmisión escalada se desplazan una respecto de la otra en ambos ejes.

En la Fig. 2.10 mostramos las propiedades de escalamiento entre las alturas de las barreras, a incidencia oblicua ( $\theta = \pi/4$ ), para electrones de Dirac masivos y sin masa. Todos los parámetros para SCGSs y ECGSs son los mismos que en la Fig. 2.9. El espectro de transmisión correspondiente a electrones de Dirac masivos y sin masa se calcula para dos alturas diferentes de la barrera, Figs. 2.10 (a) y (c), respectivamente. A primera vista, los espectros de transmisión de electrones de Dirac masivos parecen diferentes, sin embargo, tienen algo en común, es decir, ambas curvas muestran una envolvente similar, comparar la curva sólida de color negro y la discontinua en rojo en la Fig. 2.10 (a). Por lo tanto, es natural pensar en una regla de escala que reproduzca una curva con respecto a la otra. Aplicando la ec. (2.2) a la transmitancia de altura  $V_0 = 0.05$  eV, obtenemos la curva escalada correspondiente, curva punteada azul en la Fig. 2.10 (b). Como podemos corroborar, se obtiene una muy buena correspondencia entre la transmitancia de referencia y la escalada. Las principales diferencias se encuentran en los mínimos de la transmisión. Incluso, parece que la coincidencia es mejor que en el caso de la escala entre generaciones, ver la Fig. 2.8 (b). En contraste, la Fig. 2.10 (d) muestra claramente que esta regla de escala no es adecuada para electrones de Dirac sin masa, debido a que se puede observar un desplazamiento notable entre las curvas, tanto en el eje de transmisión como en el de energía. Aún más, las envolventes de las curvas no son correspondientes, véanse las Figs.

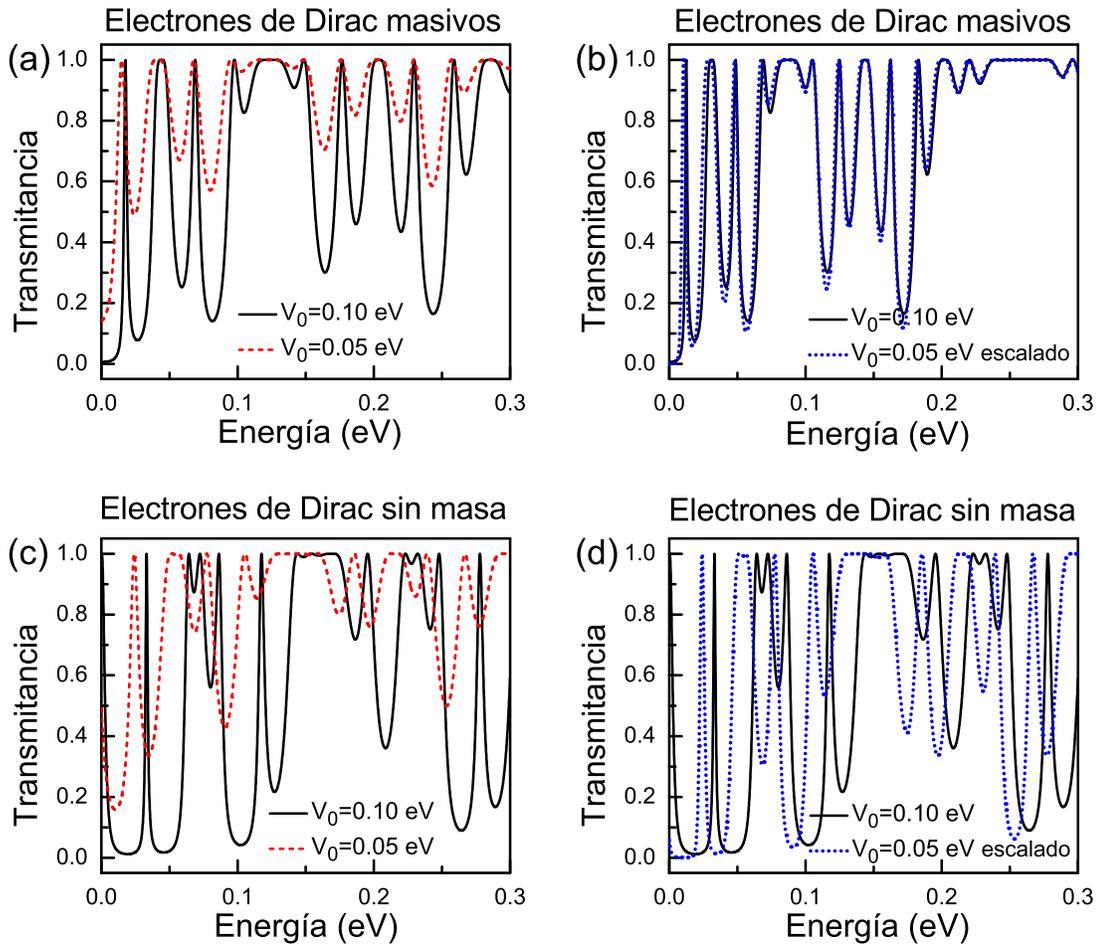


Figura 2.10: Lo mismo que en la Fig. 2.9, pero para SCGSs (primer renglón) y ECGSs (segundo renglón), a incidencia oblicua  $\theta = \pi/4$ . Como en la Fig. 2.9, los electrones de Dirac masivos presentan excelentes propiedades de escalamiento.

2.10 (c) y (d). En resumen, podemos decir que la escala entre alturas es válida para los electrones de Dirac masivos, independientemente de si los electrones llegan a incidencia normal u oblicua.

Otros patrones auto-similares en las propiedades de transmisión ocurren cuando se toma en cuenta una estructura con dos longitudes diferentes. Con la longitud del sistema, nos referimos al ancho de la barrera en la primera generación de la estructura. Dentro de este contexto, la siguiente expresión se usa para estudiar esta propiedad de escalamiento [56],

$$T_w(E) \approx [T_{\frac{1}{\alpha}w}(\frac{1}{\alpha}E)]^{\alpha^2}, \quad (2.3)$$

donde el subíndice  $w$  se refiere a la longitud del sistema y el factor  $\alpha$  viene en múltiplos de dos. En este punto, es importante señalar que esta expresión es un poco diferente con respecto a las anteriores, ya que además de escalar la transmisión, se requiere que el argumento (la energía) de la misma también sea escalado.

Aplicando esta expresión al caso de los electrones de Dirac masivos y a los electrones de Schrödinger a incidencia normal (Fig. 2.11), podemos ver que se obtiene un buen escalamiento para electrones de Dirac masivos, ver Fig. 2.11 (b). En este caso los parámetros estructurales son  $N = 6$  y  $V_0 = 0.13$  eV. Además, hemos elegido como longitudes del sistema  $w = 1000a$  y  $w = 500a$ , el primero representa el sistema de referencia y el segundo el escalado. Aquí, el factor  $\alpha$  es igual a 2, por lo que las transmisiones de referencia y la escalada están relacionadas por la expresión  $T_{1000a}(E) \approx [T_{500a}(\frac{1}{2}E)]^4$ . La coincidencia entre estas curvas es bastante sorprendente, ya que a primera vista son totalmente diferentes, compárense las curvas sólida en negro y la discontinua en rojo en la Fig. 2.11 (a). Ahora, considerando el caso de electrones de Schrödinger, ver Fig. 2.11 (d), resulta que la transmisión de referencia y la escalada son prácticamente diferentes. Incluso, este caso empeora a medida que se compara con las otras reglas de escala, véanse las Figs. 2.7 (d) y 2.9 (d). Entonces, hasta donde podemos ver, las propiedades de transmisión de los electrones de Schrödinger no manifiestan un comportamiento auto-similar. Por otro lado, si aplicamos esta regla de escala a la propagación de electrones en SCGSs y ECGSs, encontramos que se presenta un escalamiento muy bueno en el caso de electrones de Dirac masivos, véase la Fig. 2.12. Incluso, cuando en este caso el escalamiento para electrones sin masa es mejor que el correspondiente para electrones de Schrödinger (vea las Figs. 2.11 (d) y 2.12 (d)), la diferencia entre la curva de referencia y la escalada es significativa, observe la curva sólida de color negro y la punteada en azul mostradas en la Fig. 2.12 (d).

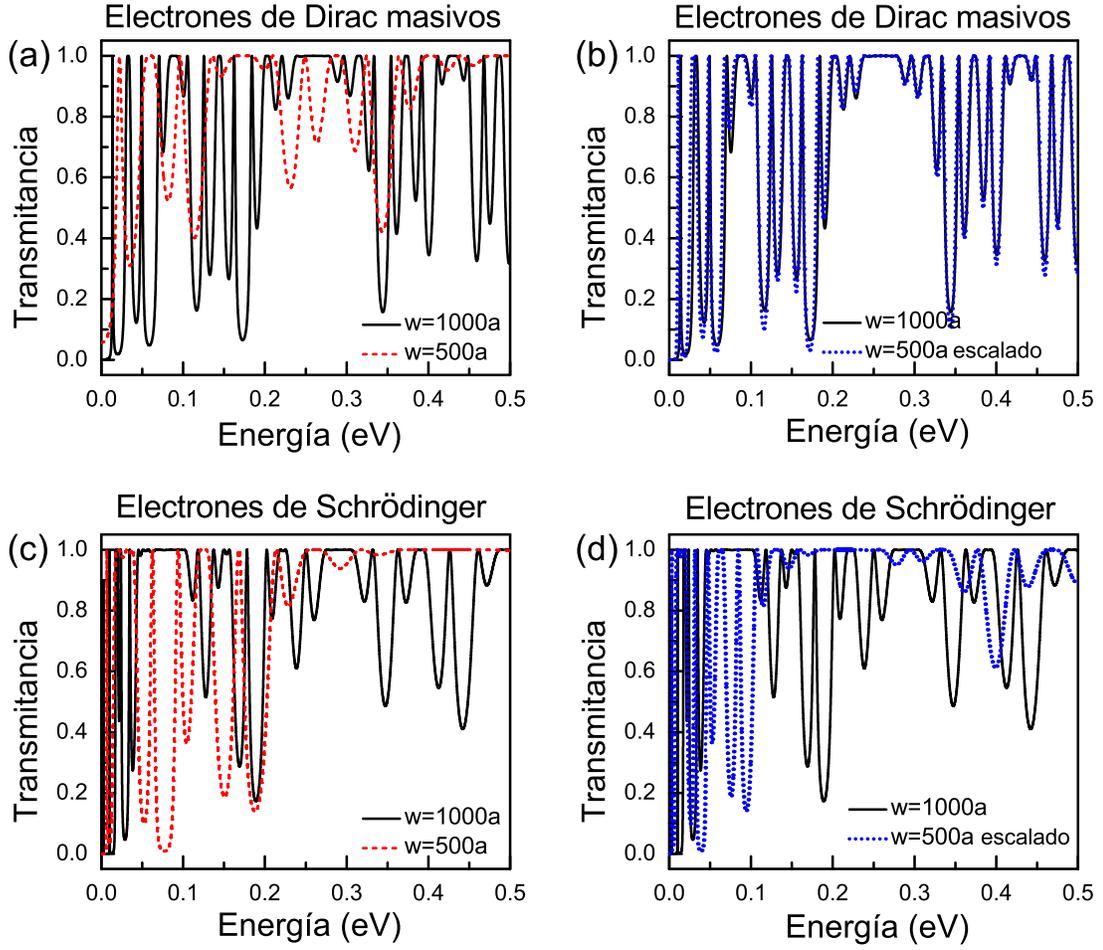


Figura 2.11: Escalamiento entre longitudes del sistema a incidencia normal para SCGSs (primer renglón) y SSs (segundo renglón). (a) Comparación de la transmitancia como función de la energía para las longitudes  $w = 1000a$  (líneas continuas negras) y  $w = 500a$  (líneas discontinuas rojas). (b) Aplicando la ec. (2.3) se obtiene la curva escalada ( $w = 500a$ ), que tiene una correspondencia excelente con la de referencia ( $w = 1000a$ ). (c) y (d) corresponden a la misma comparación que en (a) y (b), pero para SSs. En este caso, la escalabilidad no está presente. Aquí, los parámetros estructurales son  $N = 6$  y  $V_0 = 0.13$  eV.

Aún más interesante, las tres reglas de escalamiento descritas anteriormente se pueden unificar por medio de la siguiente expresión de escalamiento general:

$$T(E, N, V_0, w) \approx [T(\frac{1}{\alpha}E, N + m, \frac{1}{k}V_0, \frac{1}{\alpha}w)]^{3^m(k\alpha)^2}, \quad (2.4)$$

donde los factores  $k$  y  $\alpha$  vienen en múltiplos de dos, y  $m$  es la diferencia entre generaciones.

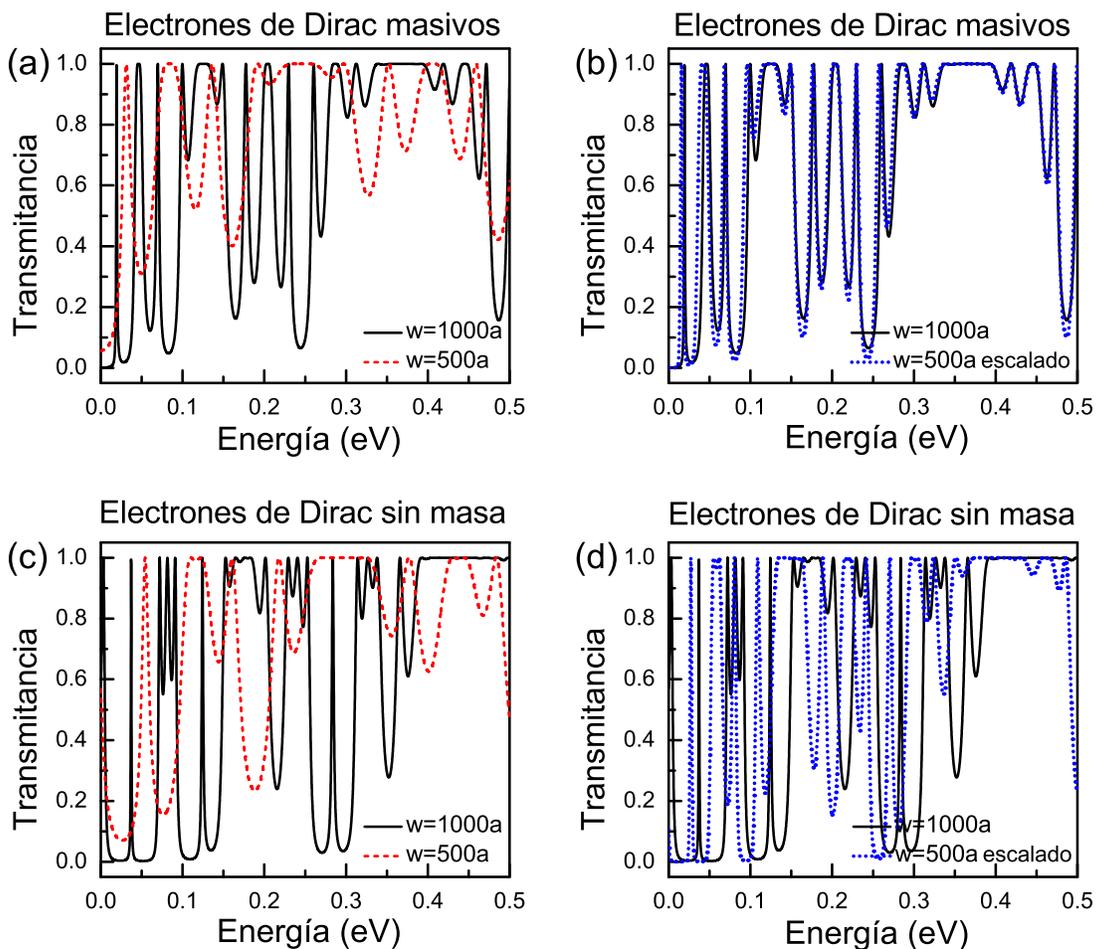


Figura 2.12: Lo mismo que en la Fig. 2.11, pero para SCGSs (primer renglón) y ECGSs (segundo renglón), a incidencia oblicua  $\theta = \pi/4$ . Como en la Fig. 2.11, los electrones de Dirac masivos presentan excelentes propiedades de escalamiento.

Como podemos ver en la Fig. 2.13, esta regla general funciona bastante bien para los electrones de Dirac masivos.

Después de analizar las diferentes reglas de escala, obtenemos que, en general, las propiedades de transmisión de los electrones de Dirac masivos presentan escalabilidad y, como consecuencia, auto-similitud. Sin embargo, hasta ahora, nuestra comparación entre la curva de referencia y la escalada ha sido visual. Lo que necesitamos ahora es obtener una medida cuantitativa de qué tan similares son estas curvas. Para abordar este problema, calculamos la desviación cuadrática media o simplemente el rmsd (del inglés root mean

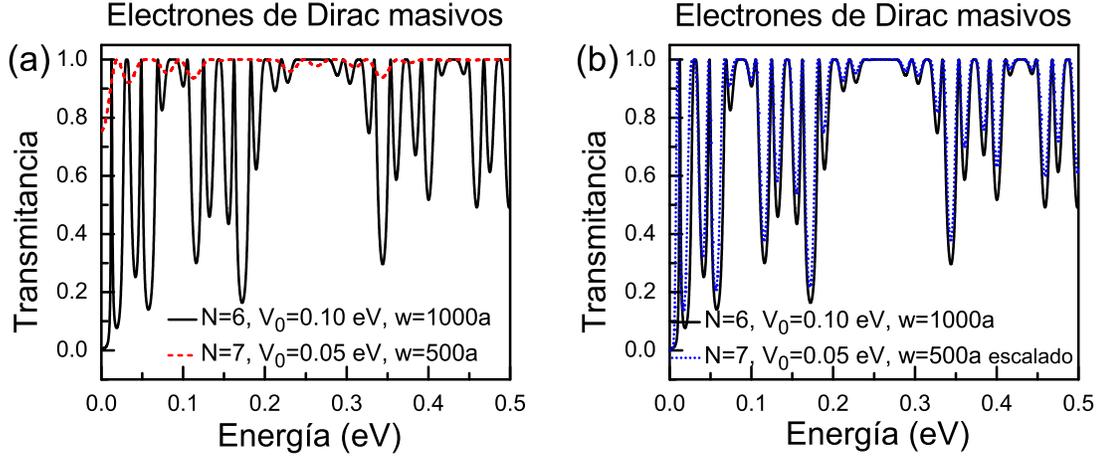


Figura 2.13: Escalamiento general a incidencia normal para SCGSs. (a) Comparación de la transmitancia como función de la energía por  $N = 6$ ,  $V_0 = 0.10$  eV y  $w = 1000a$  (líneas continuas negras) y  $N = 7$ ,  $V_0 = 0.05$  eV y  $w = 500a$  (líneas discontinuas rojas). (b) Aplicando la ec. (2.4) se obtiene la curva escalada (líneas punteadas azules), que tiene una correspondencia excelente con la curva de referencia (líneas continuas negras). Como en todas las figuras anteriores, los electrones de Dirac masivos presentan excelentes propiedades de escalabilidad.

square deviaton), que es una medida estándar para comparar curvas. Si las curvas tienden a ser exactamente iguales, este valor es prácticamente cero. Por ejemplo, el rmsd de los electrones masivos a incidencia normal para el escalamiento entre generaciones  $N$ , alturas  $V_0$  y longitudes  $w$  es 0.134303480, 0.110821329 y 0.133542433, respectivamente. De la misma manera, los correspondientes para electrones de Schrödinger son: 0.256470233, 0.276356488 y 0.52796197. En el caso de electrones de Dirac masivos a incidencia oblicua estos valores son 0.159395278, 0.131747648 y 0.157041878, mientras que los correspondientes a los electrones de Dirac sin masa se convierten en 0.448230058, 0.478004634 y 0.463266015. Con base a estas mediciones resulta que prácticamente en todos los casos el rmsd es más pequeño para los electrones de Dirac masivos. En particular, el rmsd para electrones masivos es 3.6 veces más pequeño que el rmsd de electrones sin masa en el caso del escalamiento entre alturas. Este valor se convierte en 2.5, si comparamos los electrones de Dirac masivos y los electrones de Schrödinger. En este punto, también es importante enfatizar que si cambiamos el rango de energía hasta 1 eV, la coincidencia entre

la transmisión de referencia y la escalada para electrones de Dirac masivos es aún mejor. Específicamente, el rmsd se vuelve un orden de magnitud más pequeño. Como observación final, podemos decir que desde el punto de vista tanto cualitativo como cuantitativo, las propiedades de transmisión de los electrones de Dirac masivos son auto-similares.

Finalmente, queremos destacar dos cuestiones importantes:

1. Hasta este momento, podemos tomar el mejor escalamiento de SCGSs como una observación, porque no tenemos una prueba analítica rigurosa al respecto. Sin embargo, creemos que la no conservación del pseudo-espín es una característica crucial para tener un mejor escalamiento y, por lo tanto, para tener auto-similitud, debido a que el sistema de electrones de Dirac masivos (SCGSs) es el único de los tres analizados con esta característica. La no conservación del pseudo-espín viene de la interacción de la sábana de grafeno con el sustrato (SiC). Esta interacción rompe la simetría (equivalencia) de las dos subredes triangulares de grafeno. Entonces, creemos que la ruptura de esta simetría permite que las características geométricas de la estructura se manifiesten en las propiedades físicas. En otras palabras, la conservación del pseudo-espín (ECGSs), que es el responsable del tunelamiento Klein y del efecto de colimación, impide que las características geométricas de la estructura surjan en las propiedades físicas (transmitancia). En este contexto, se necesitan más estudios en estructuras tipo Cantor con otro tipo de barreras en las que no se conserve el pseudo-espín. Las barreras de magnéticas [59] y las barreras basadas en tensión [60] podrían ser una posibilidad.
2. Como podemos ver en la literatura, las estructuras aperiódicas de Cantor exhiben, bajo ciertas condiciones específicas, estados exóticos interesantes tales como los extendidos [61, 62] y atrapados o los modos “solitonlike” [63]. En el primer caso, una de las condiciones apropiadas para obtener dichos estados es la forma de convertir la estructura de Cantor en una matriz periódica del triplete ABA. En este último

caso, es necesario que la tercer cuarta estructura de Cantor se comporte como un conjunto de pozos aislados, lo que ocurre cuando el potencial es lo suficientemente grande como para garantizar eso. Además, si se considera un término no lineal en el Hamiltoniano de Schrödinger resulta que los modos más bajos y más altos, en el pozo más grande, son las únicas soluciones que manifiestan un carácter tipo “solitonlike”. Sin embargo, en estructuras de grafeno tipo Cantor el ángulo de incidencia así como la conservación y no conservación del pseudo-espín desempeñarán un papel importante. El estudio de estos estados en el grafeno es bastante interesante y requiere una evaluación minuciosa y detallada. Por lo que sabemos, estos estados exóticos aún no se han estudiado en estructuras de grafeno tipo Cantor y, por lo tanto, constituyen un interesante problema a tratar.

## 2.6. Conclusiones

En resumen, hemos estudiado la auto-similitud y el escalamiento de las propiedades de transmisión de estructuras tipo Cantor basadas a grafeno. El formalismo de la matriz de transferencia se ha utilizado para calcular los espectros de transmisión. En particular, se propusieron e implementaron tres expresiones matemáticas para tal fin, encontrando tres reglas de escala diferentes, que se asocian con tres parámetros fundamentales: el número de generación, la altura de las barreras y la longitud del sistema. Por lo tanto, se realizó un análisis comparativo del escalamiento entre generaciones, alturas y longitudes del sistema para electrones de Dirac masivos y sin masa, así como para electrones de Schrödinger, obteniendo que el mejor escalamiento resulta ser para electrones de Dirac masivos. Este resultado es válido tanto para incidencia normal como oblicua. Finalmente, hasta donde podemos ver para obtener características auto-similares en las propiedades físicas, tales como la transmitancia, es necesario que se cumplan tres condiciones: electrones de Dirac relativistas, una estructura auto-similar y la no conservación del pseudo-espín (electrones

de Dirac masivos).

---

### Transmisión y transporte con campo magnético

---

#### 3.1. Introducción

Uno de los materiales bidimensionales más relevantes descubiertos hasta ahora ha sido indudablemente la capa atómica de grafito mejor conocida como grafeno [8, 9], debido a sus propiedades intrínsecas fundamentales [10–16]. Sin embargo, desde el punto de vista tecnológico, específicamente para dispositivos electrónicos y optoelectrónicos, surge una limitación en este material bidimensional como consecuencia de la conductividad mínima [8–10]. Lo mismo ocurre a causa del llamado tunelamiento o efecto Klein [14], lo que significa que una partícula puede penetrar, con una probabilidad unitaria, una barrera de potencial electrostática independientemente de su altura y anchura a incidencia normal, Fig. 3.1 (a). En contraste con el tunelamiento convencional en semiconductores donde la transmisión decae exponencialmente con la altura y el ancho de la barrera, Fig. 3.1 (b). En este contexto, el confinamiento de los electrones de Dirac en este tipo de estructuras

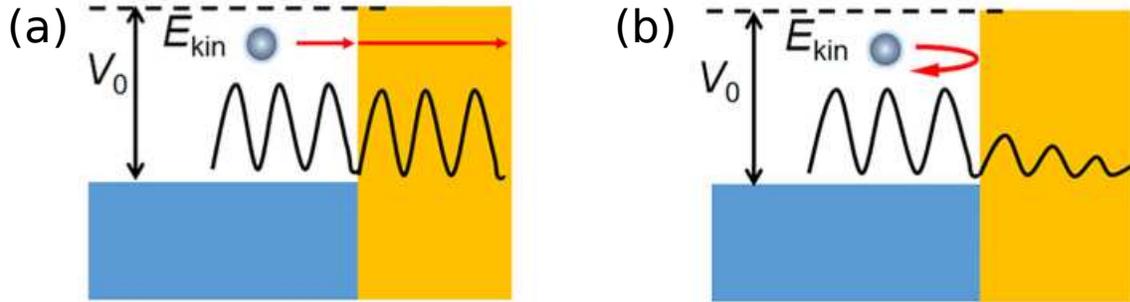


Figura 3.1: (a) Electrones relativistas manifestado el tunelamiento Klein en grafeno. (b) Electrones no relativistas.

representa un problema. Para eludir este inconveniente, se ha propuesto el confinamiento magnético [59,64] como mecanismo para tal fin. En este sentido, el campo magnético desvía las trayectorias de los electrones de Dirac a través de la fuerza de Lorentz. De esta forma, los electrones de Dirac quedan atrapados en alguna región específica. Este confinamiento es bastante prometedor porque podría lograrse a través de tiras ferromagnéticas (Fig. 3.2 (a)) o tensión (Fig. 3.2 (b)) [60,65].

Desde el trabajo pionero de De Martino et al. [59,64] se ha realizado una gran cantidad de investigaciones sobre la modulación magnética en el grafeno [66–94]. La mayor parte de esta investigación se ha centrado en sistemas periódicos y se ha prestado menos atención a las estructuras aperiódicas. Por lo que sabemos, pocos de los reportes que tratan de los efectos magnéticos en sistemas aperiódicos se pueden encontrar en la literatura [35,37,39,95–97]. En particular, se han llevado a cabo estudios en las estructuras Fibonacci [95], Thue-Morse [35,95,96] y Cantor [37,39,97]. En particular, las estructuras de Cantor se consideran bastante interesantes debido a su compleja estructura geométrica [98,99]. De hecho, recientemente, la secuencia de Cantor se ha implementado para estudiar una gran variedad de propiedades físicas en grafeno [100–102]. Prácticamente todos los reportes mencionados sobre modulación magnética tienen dos aspectos en común: 1) una configuración de campo magnético no homogéneo a lo largo de la dirección  $x$  para hacer arreglos de barrera magnética, y 2) oscilaciones de conductancia como propiedad

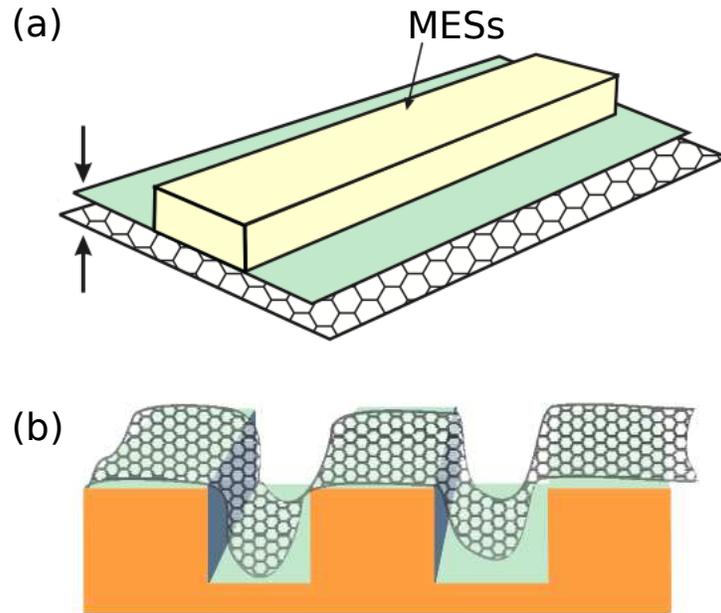


Figura 3.2: (a) Tiras ferromagnéticas o magnetoeléctricas (MESs) depositadas encima de una sábana de grafeno [65]. (b) Sábana de grafeno colocada en la parte superior de un sustrato estructurado periódicamente, aquí el grafeno se tensiona en los bordes del sustrato [60].

fundamental. Hasta donde sabemos, este último aspecto no se explica del todo en sistemas periódicos y aperiódicos. Las estructuras tipo Cantor no son la excepción, por lo tanto, consideramos que es esencial llevar a cabo un estudio detallado para comprender las propiedades de transmisión y transporte, específicamente, el carácter oscilante de la conductancia.

En este capítulo, implementamos el enfoque de la matriz de transferencia y el formalismo de Landauer-Büttiker para estudiar las propiedades de transmisión y transporte de las barreras magnetoeléctricas en un sistema Cantor basado en grafeno. Para diseñar nuestro sistema, consideramos campos magnéticos y eléctricos aplicados perpendicularmente a la sábana de grafeno en regiones alternas de tal manera que la modulación magnetoeléctrica tiene una configuración tipo Cantor. Nuestra investigación se enfoca en estudiar cómo la transmitancia y la conductancia modifican su comportamiento a medida que cambia la generación de la estructura. Además, este mecanismo de generar barreras brinda la

posibilidad de comparar al mismo tiempo estas propiedades físicas tanto para barreras magnéticas como para magnetoeléctricas. En general, la conductancia manifiesta un comportamiento oscilatorio, el cual se puede describir con ayuda de los picos que dan lugar a las oscilaciones a través de las gráficas de contornos de transmisión en el espacio  $(E, k_y)$ . Por lo tanto, podemos asociar las características de los picos, como la forma y la ubicación, con este tipo de gráficos.

## 3.2. Motivación

Como se pudo verificar en la sección anterior sin ser exhaustivos, las propiedades de transmisión y transporte en CGSs manifiestan ciertas peculiaridades, como lo es el carácter oscilante de la conductancia. Sin embargo, hasta el momento no hemos encontrado una explicación contundente sobre el factor o los factores que determinan el carácter oscilante mencionado, y mucho menos una explicación clara y concisa sobre el papel que desempeña el tunelamiento Klein en las propiedades físicas.

## 3.3. Objetivos

El objetivo principal, de este tercer capítulo, es investigar las propiedades de transmisión y transporte de los electrones de Dirac en estructuras de grafeno tipo Cantor bajo efectos magnetoeléctricos. Se estudian dos sistemas de barreras de potencial: el primero formado por barreras magnéticas y el segundo por barreras magnetoeléctricas. En ambos casos las barreras se encuentran distribuidas con base a la secuencia del conjunto Cantor. Para cumplir este objetivo se han establecido los siguientes puntos:

- Computar la transmitancia como función de la energía y, por otro lado, como función del ángulo de incidencia, tanto para barreras magnéticas como magnetoeléctricas al variar el ancho de partida  $w$ , el número de generación de la secuencia Cantor  $N$  y

el ángulo de incidencia  $\theta$ .

- Determinar la conductancia de los electrones de Dirac en ambos tipos de barreras: magnéticas y magnetoeléctricas. Se analizará como se modifican sus propiedades al variar los parámetros fundamentales  $w$ ,  $N$  y  $\theta$ .
- Cálculo y análisis de las gráficas de contornos de transmisión en el espacio  $(E, k_y)$ , ésto con el fin de describir y entender a profundidad el origen del comportamiento oscilatorio de la conductancia.

## 3.4. Metodología

### 3.4.1. Barreras vía campo magnético

Para ilustrar el sistema de interés que abordaremos en este capítulo mostraremos en la Fig. 3.3 ciertos aspectos básicos como lo son la sección transversal y la distribución de los campos magnéticos y eléctricos. En general, denominaremos de ahora en adelante nuestro sistema con el nombre de estructuras de grafeno magnetoeléctricas tipo Cantor (MECGSs). Además, se incorporan tiras magnetoeléctricas las cuales son depositadas sobre una sábana de grafeno y se distribuyen en la dirección  $x$  siguiendo la secuencia del conjunto Cantor, ver la Fig. 3.3 (a). La distribución y la forma de los campos magnéticos y eléctricos están moduladas por las tiras magnetoeléctricas, ver Fig. 3.3 (b).

En presencia de campos magnéticos y eléctricos, un electrón de Dirac que se mueve en una sábana de grafeno se describe mediante la siguiente ecuación de Dirac,

$$[v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) + V(x)\sigma_0]\psi(x, y) = E\psi(x, y), \quad (3.1)$$

donde  $v_F$  es la velocidad de Fermi de la partícula en grafeno,  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$  son las matrices de Pauli,  $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$  es el operador de momento de los electrones de Dirac,  $\mathbf{A} = (0, A_y, 0)$

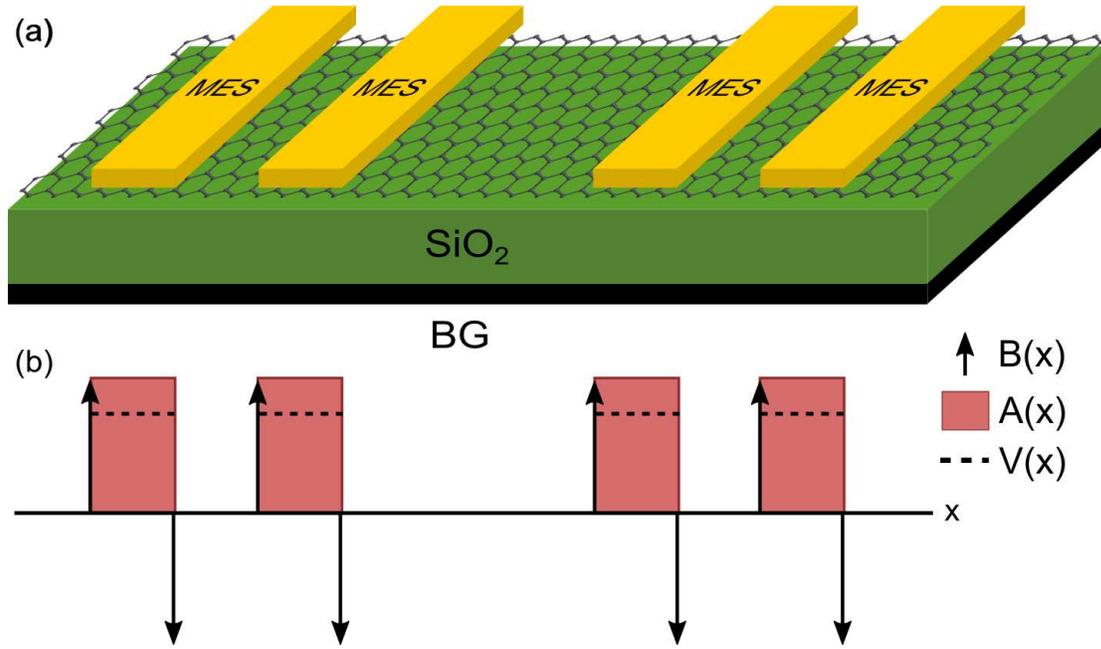


Figura 3.3: (a) Esquema de la sección transversal de MECGSs. Las tiras magnetoeléctricas (MESs) se depositan en la parte superior de la sábana de grafeno, que a su vez ésta última se encuentra sobre un sustrato que no interactúa, como  $\text{SiO}_2$ . La distribución y la forma del campo magnético y eléctrico están moduladas por MESs. (b) El campo magnético  $B(x)$  está representado por flechas negras, el potencial vectorial  $A(x)$  por el área sombreada roja y el potencial escalar  $V(x)$  por las líneas discontinuas negras.

es el potencial vectorial dado en la norma de Landau,  $V(x)$  es el potencial escalar,  $\sigma_0$  es la matriz unitaria  $2 \times 2$  y  $\psi(x, y)$  la función de onda tipo bi-espinor.

Para nuestro problema específico, el potencial vectorial y escalar vienen como  $\mathbf{A}(x) = A_y \hat{y} = B_0 l_B \hat{y}$  y  $V(x) = U_0$ , respectivamente. Aquí las cantidades,  $B_0$ ,  $l_B = \sqrt{\hbar/eB_0}$  y  $E_0 = \hbar v_F/l_B$  se refieren a la intensidad y longitud del campo magnético así como a la unidad de energía, respectivamente. Al resolver la ecuación de auto-valores podemos obtener la relación de dispersión,

$$E = U_0 \pm \sqrt{\hbar^2 v_F^2 q_x^2 + v_F^2 (\hbar q_y + e A_y)^2}, \quad (3.2)$$

donde  $U_0$  es la intensidad del potencial electrostático,  $q$  es el vector bidimensional, y el signo  $+$  ( $-$ ) representa a los electrones (huecos). Por conveniencia, expresaremos  $U_0$  en

unidades de  $E_0$  y el campo magnético  $B$  en términos de  $B_0$ . Además, las funciones de onda se expresan como,

$$\psi_{\pm}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ v_{\pm} \end{pmatrix} e^{\pm iq_x x + iq_y y}, \quad (3.3)$$

con

$$v_{\pm} = \frac{\hbar v_F \left( \pm q_x + i \left( q_y + \frac{e}{\hbar} A_y \right) \right)}{E - U_0}. \quad (3.4)$$

De manera similar, para las regiones que conforman los pozos, esto es, aquellas regiones donde hay ausencia de campos magnéticos y eléctricos, la ecuación de tipo Dirac se puede resolver dando la relación de dispersión lineal,

$$E = \pm \hbar v_F \sqrt{k_x^2 + k_y^2}, \quad (3.5)$$

y las funciones de onda toman la forma,

$$\psi_{\pm}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ u_{\pm} \end{pmatrix} e^{\pm ik_x x + ik_y y}, \quad (3.6)$$

con

$$u_{\pm} = \frac{\hbar v_F (\pm k_x + ik_y)}{E}. \quad (3.7)$$

Al igual que en los sistemas descritos en los dos capítulos anteriores, es necesario recurrir al enfoque de la matriz de transferencia [44, 45] para calcular la transmitancia en las barreras magnetoeléctricas. Para hacer esto, necesitamos las relaciones de dispersión de energía y las funciones de onda con y sin efectos magnetoeléctricos definidas previamente. Del mismo modo, se requiere la conservación del momento en la componente  $y$ , es decir, que  $k_y = q_y$ . Así como la continuidad de la función de onda en cada interfaz de MECGSs.

En estas circunstancias, los coeficientes de las funciones de onda del medio inicial y final del sistema se pueden conectar mediante la matriz de transferencia  $M$ .

Una vez determinadas las propiedades de transmisión como viene siendo la transmitancia o coeficiente de transmisión, toca el turno de analizar las propiedades de transporte que en esta ocasión se refiere a la conductancia. Ésta última es posible estudiarla gracias a la fórmula de Landauer-Büttker definida por la ec. (1.56).

### 3.5. Resultados

Con base a nuestra formulación anterior, es posible abordar nuestro objetivo principal el cual consiste en explorar los efectos magnéticos en las propiedades de transmisión y transporte de MECGSs. Para nuestros resultados numéricos usamos un valor realista típico del campo magnético  $B_0 = 0.1$  T, para lo cual  $l_B = 811$  Å y  $E_0 = 7.0$  meV. A partir de ahora  $B_0$ ,  $l_B$  y  $E_0$  serán las unidades para el campo magnético, la longitud magnética y la energía, respectivamente.

En primera instancia, analizaremos la evolución de la transmitancia como función de la energía para diferentes generaciones. En particular, trabajamos con las generaciones 5, 6 y 7, representadas por el primer, segundo y tercer renglón de la Fig. 3.4. La columna de la izquierda (Figs. 3.4 (a), (c) y (e)) y de la derecha (Figs. 3.4 (b), (d) y (f)) corresponden a barreras magnéticas ( $U = 0$ ) y magnetoeléctricas ( $U_0 = 2E_0$ ), respectivamente. En todos estos casos, hemos considerado un ángulo de incidencia, un ancho inicial de las estructuras Cantor y una intensidad de campo magnético de  $\theta = \pi/4$ ,  $w = 20 l_B$  y  $B = 2B_0$ , respectivamente. Como podemos observar, una de las principales diferencias entre las barreras magnéticas y las magnetoeléctricas es el carácter simétrico y asimétrico de los patrones de transmisión. Podemos entender esta diferencia teniendo en cuenta que el cambio fundamental cuando se aplica campo magnético es un desplazamiento de los conos Dirac en la componente del vector de onda transversal, por esta razón no se esperan

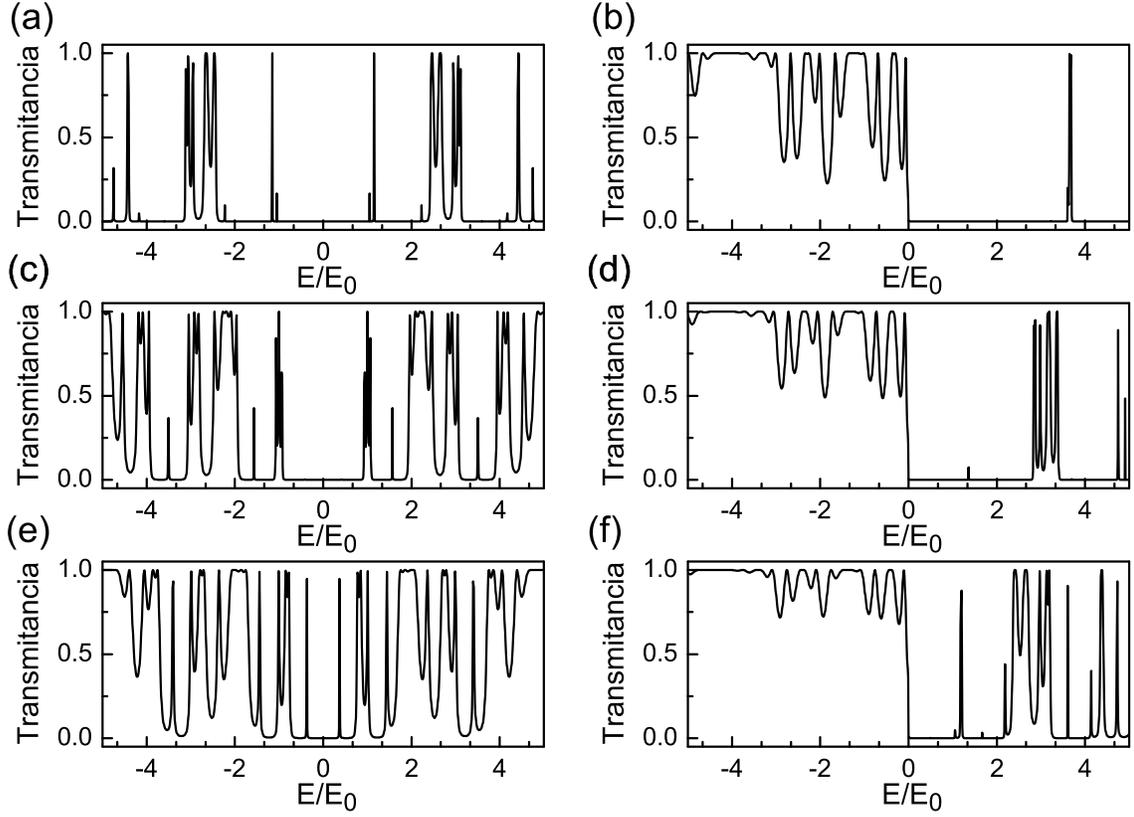


Figura 3.4: Transmitancia como función de la energía incidente para diferentes generaciones:  $N = 5$  ((a) y (b)),  $N = 6$  ((c) y (d)) y  $N = 7$  ((e) y (f)), respectivamente. El ancho inicial es  $w = 20 l_B$ , el ángulo de incidencia se fija en  $\theta = \pi/4$ , la intensidad del campo magnético es  $B = 2B_0$  y la barrera electrostática es  $U = 2E_0$ . (a), (c) y (e) corresponden a barreras magnéticas, mientras que (b), (d) y (f) a barreras magnetoelectricas.

espectros asimétricos con respecto a la energía. En este punto, es importante mencionar que la componente transversal del vector de onda está conectada con el ángulo de incidencia, por lo tanto, se presentará una probabilidad de transmisión asimétrica con respecto al ángulo de incidencia. Por otro lado, cuando se consideran los efectos magnetoelectricos, los conos de Dirac se desplazan tanto en el eje de la energía como en la componente transversal del vector de onda, como resultado los patrones de transmisión serán asimétricos con respecto a la energía y al ángulo. Además, si prestamos atención al espectro de transmisión de  $N = 5$  (Fig. 3.4 (a)), podemos ver regiones amplias donde la probabilidad de transmisión

es nula. Además, en el intervalo  $-2 < E/E_0 < 2$  se produce un fenómeno de bifurcación a medida que la generación aumenta, es decir, las regiones de baja transmisión se dividen en transmisiones bajas y altas. En el caso de  $N = 6$ , Fig. 3.4 (c), hay una brecha de transmisión bien definida centrada en  $E = 0$ . Ahora, al aumentar la generación hasta  $N = 7$ , Fig. 3.4 (e), surgen tres brechas de transmisión. Algo similar ocurre con las barreras magnetoeléctricas, donde las brechas de transmisión son más pronunciadas a generaciones bajas. Por ejemplo, se presenta una gran brecha de transmisión en el rango de energía  $0 < E/E_0 < 3.5$ , ver Fig. 3.4 (b), que luego se divide en varias regiones de transmisión baja y alta, ver Fig. 3.4 (f). En general, el aumento de la transmitancia y el proceso de bifurcación son las dos características principales cuando aumenta la generación en ambos casos: barreras magnéticas y magnetoeléctricas. Otra característica importante de las curvas de transmisión para las barreras magnetoeléctricas son las bandas continuas presentadas para los huecos, véanse las Figs. 3.4 (b), (d) y (f). Estas bandas continuas también se obtuvieron para barreras electrostáticas puras en estructuras de grafeno tipo Cantor [103]. En ese trabajo, se consideraron barreras para los electrones, por consiguiente, las características de transmisión fueron diferentes para los electrones y huecos. Además, a medida que aumentaba la generación de la estructura tipo Cantor, las características de transmisión también se modificaban. En particular, a medida que la generación aumenta, las bandas continuas se amplían y tienden a cubrir un rango más amplio de ángulo y energía. La razón principal de esto es la reducción del ancho de las barreras a medida que aumenta la generación. Para las barreras magnetoeléctricas, que es el caso a estudiar, el campo magnético cambia el panorama de las propiedades de transmisión. Específicamente, los contornos de transmisión están distorsionados y el campo magnético favorece a la formación de bandas continuas en la región de los huecos para ángulos positivos. Estas bandas son una consecuencia directa de la dependencia peculiar de la transmitancia con respecto al ángulo y la energía de los electrones incidentes en el grafeno. En este punto, también es importante mencionar que algunas propiedades asociadas con las características

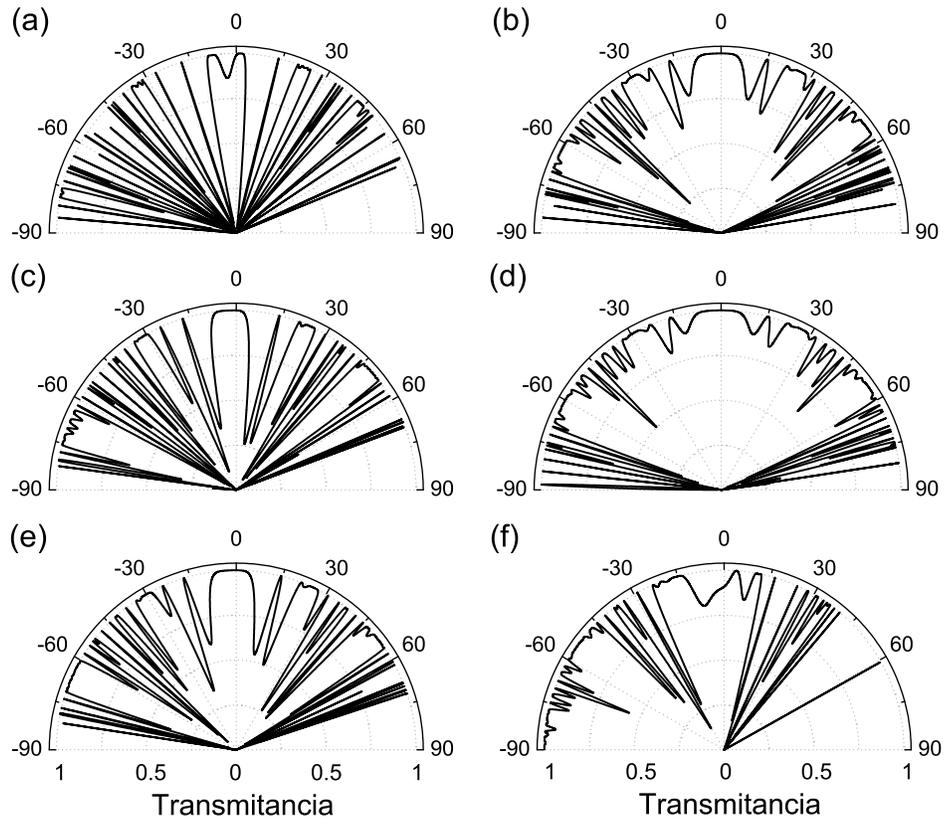


Figura 3.5: Dependencia angular de la transmitancia para diferentes generaciones. La energía de los electrones incidentes es  $E_i = 6E_0$ . El resto de los otros parámetros, así como la distribución de los seis paneles, es el mismo que en la Fig. 3.4.

de construcción de nuestro sistema se eliminan con la incorporación del campo magnético. Por ejemplo, la agrupación triádica de resonancias y subbandas de energía [103] ya no se conserva después de la inclusión del campo magnético.

En la Fig. 3.5 mostramos la distribución angular de la transmitancia o, en otras palabras, la transmitancia en función del ángulo de incidencia. Como se mencionó previamente, estamos analizando las peculiaridades de las barreras magnéticas y magnetoelectricas. Entonces, la distribución de renglones y columnas es la misma que en la Fig. 3.4. La energía de los electrones incidentes se fija en  $E_i = 6E_0$  y el resto de los parámetros son los mismos que en la Fig. 3.4. Para las barreras magnéticas, podemos observar que a medida que la

generación aumenta las regiones de transmisión alta en ángulos pequeños se ensanchan, véase el pico central en el espectro de la Fig. 3.5 (a), (b) y (c). Algo similar ocurre con las otras regiones de alta probabilidad de transmisión. Además, para las generaciones más altas, los picos se vuelven menos agudos y profundos. Para las barreras magnetoeléctricas, los electrones de Dirac presentan una alta probabilidad de transmisión para pequeños ángulos de incidencia, Fig. 3.5 (b) y (d). Otro aspecto a resaltar es que los patrones de transmisión se vuelven menos simétricos a medida que aumenta la generación. Y como consecuencia, se forma un dominio de reflexión perfecta en el rango de  $60^\circ$  a  $90^\circ$ , Fig. 3.5 (f). En el rango angular opuesto, de  $-60^\circ$  a  $-90^\circ$ , se presenta un dominio de transmisión alta. En general, todos los espectros de transmisión son altamente anisotrópicos, es decir, son dependientes del ángulo de incidencia.

Continuando con el análisis de las propiedades de transmisión y con el objetivo de tener una visión más amplia presentamos la unificación de la transmitancia como función de la energía y el ángulo de incidencia por medio de las denominadas gráficas de contornos. Estos contornos son mapas de la transmitancia en el espacio  $(\theta, E)$ , como se muestra en la Fig. 3.6. Al igual que en los casos anteriores hemos considerado las barreras magnéticas y magnetoeléctricas, así como las generaciones 5, 6 y 7. Luego, la distribución de renglones y columnas en la Fig. 3.6 es la misma que en la Fig. 3.4 y Fig. 3.5. Además, es importante señalar que el eje del ángulo de incidencia tiene un rango de -1 a 1, ya que hemos normalizado  $\theta$  a  $\theta_0 = \pi/2$ . Las situaciones de transmisiones perfectas y nulas están indicadas por las regiones sombreadas en rojo y blanco, respectivamente. Cuando consideramos solo los efectos magnéticos resulta que se presentan patrones semicirculares de alta transmisión. Al aumentar la generación, estos patrones se vuelven más pronunciados. También podemos observar las características simétricas de la transmitancia con respecto a la energía, así como las asimétricas con respecto al ángulo. En el caso de las barreras magnetoeléctricas, podemos ver características bastante diferentes. En primer lugar, los contornos ya no son simétricos con respecto a la energía, ni con respecto al ángulo. De

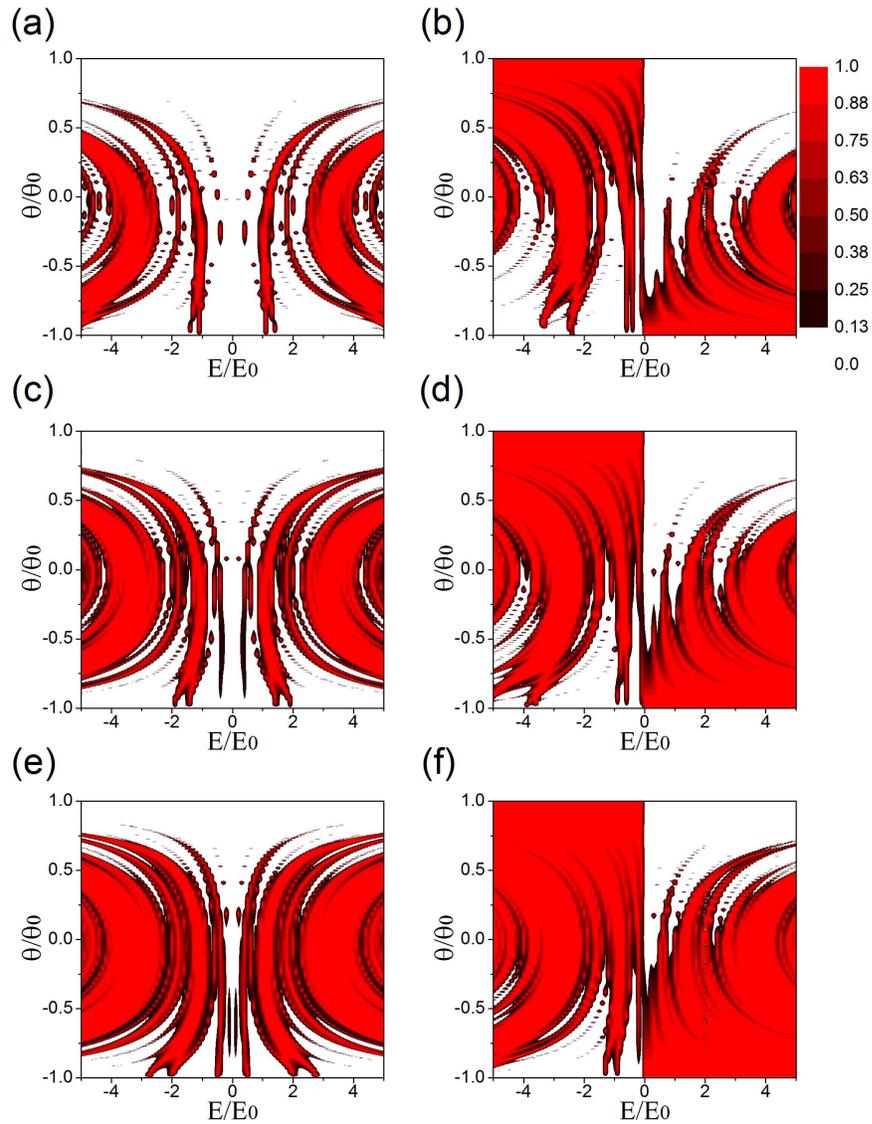


Figura 3.6: Gráficos de contornos de la transmitancia como función de la energía y el ángulo de incidencia para diferentes generaciones. El resto de los otros parámetros, así como la distribución de los seis paneles, son los mismos que en la Fig. 3.4.

hecho, para las energías positivas y los ángulos negativos, los contornos se distorsionan hacia abajo. Por el contrario, para energías negativas y ángulos positivos, los contornos están distorsionados pero hacia arriba. El grado de distorsión se modula por la intensidad del campo magnético. Otra característica importante es la ventana de transmisión despreciable, la cual es observable para energías positivas y grandes ángulos positivos, ver Fig.

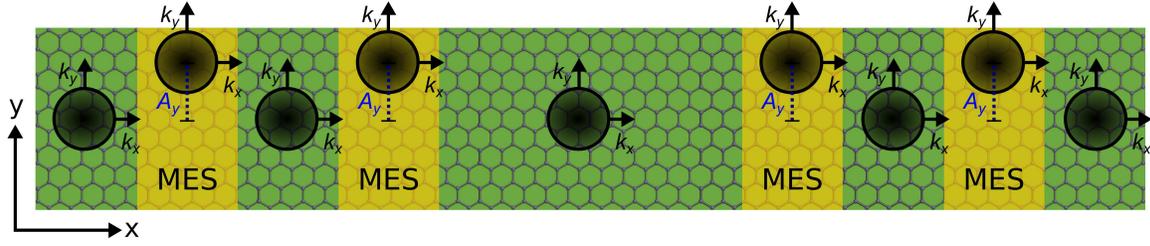


Figura 3.7: Representación esquemática de la distribución de los conos de Dirac en estructuras de grafeno tipo Cantor bajo la influencia de campo magnético. Los conos Dirac en esas regiones bajo el efecto del campo magnético se desplazan una distancia, en el espacio recíproco, proporcional a la intensidad del campo magnético.

3.6 (b), (d) y (f).

Entonces, considerando estos resultados podemos decir que una consecuencia directa del campo magnético es la distorsión de los contornos de transmisión. Esta distorsión implica o se relaciona con los cambios de los conos Dirac, así como con los vectores de onda en aquellas regiones bajo la influencia del campo magnético. Específicamente:

1. Los conos de Dirac se desplazan una distancia, en el espacio recíproco, proporcional a la intensidad del campo magnético, véase la Fig. 3.7.
2. La inclusión del campo magnético modifica los vectores de onda en las regiones de las barreras. Los vectores de onda determinan el carácter de los estados de los electrones y los huecos. Matemáticamente hablando, tenemos que el vector de onda se define como,

$$q = \frac{1}{\hbar v_F} \sqrt{(E - U_0)^2 - v_F^2 (\hbar k_y + eA_y)^2},$$

con

$$k_y = \frac{|E|}{\hbar v_F} \sin(\theta).$$

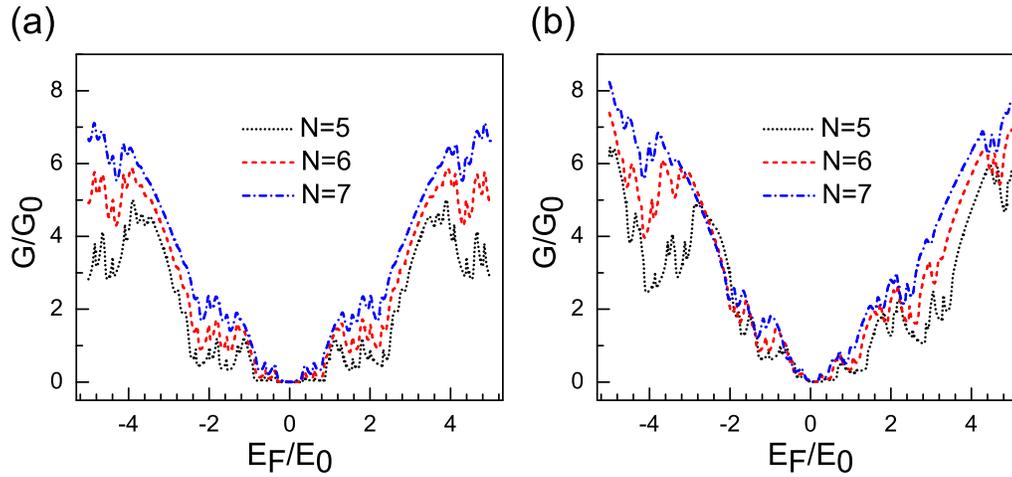


Figura 3.8: Conductancia como función de la energía de Fermi para (a) barreras magnéticas y (b) barreras magnetoeléctricas. En ambos casos (a) y (b), la generación  $N = 5$ ,  $N = 6$  y  $N = 7$  corresponden a líneas discontinuas negras, líneas punteadas rojas y líneas punteadas azules, respectivamente. Los otros parámetros son los mismos que en la Fig. 3.4.

Entonces, algunos estados que se propagaban en ausencia del campo magnético se vuelven evanescentes bajo la influencia de él y viceversa, ese es el caso de los electrones y los huecos para ángulos positivos.

También vale la pena señalar que a medida que la generación aumenta los mapas de la transmisión, para ambos tipos de barreras, están dominados por regiones de alta transmisión. Esto es una consecuencia de que a medida que la generación aumenta, el ancho de las barreras se reduce a  $3^{N-1}$ . Como podemos ver, las barreras magnéticas y magnetoeléctricas tienen características de transmisión bastante diferentes. Entonces, en principio, podemos modular la transmisión, y por lo tanto el transporte, al adaptar los campos magnéticos o magnetoeléctricos, así como el grado de aperiodicidad (generación) de la estructura.

Ahora es el turno de analizar las propiedades de transporte ilustradas en la Fig. 3.8. Las curvas asociadas a la conductancia en régimen lineal para las barreras magnéticas y magnetoeléctricas se muestran en la Fig. 3.8 (a) y (b), respectivamente. Las líneas

punteadas negras, punteadas rojas y punteadas azules corresponden a las generaciones 5, 6 y 7, respectivamente. Como la conductancia es la suma de todos los canales de transmisión, todos los ángulos, sus características están directamente relacionadas con los patrones de transmisión. Por ejemplo, si fijamos la energía de Fermi en los mapas de transmisión y sumamos todos los ángulos obtendremos una imagen fiel de la conductancia para esa energía específica. Entonces, las características simétricas y asimétricas de la transmisión para las barreras magnéticas y magnetoelectricas se reflejan en la conductancia. Además, a medida que la generación del sistema aumenta, la conductancia mejora prácticamente en todo el rango de energía. Otra característica en todas las curvas es el carácter oscilatorio de la conductancia. De hecho, a medida que la generación aumenta, el carácter oscilatorio es menos perceptible. También podemos observar que la distribución de estas oscilaciones es diferente para las barreras magnéticas y magnetoelectricas.

Finalmente, para comprender el comportamiento oscilatorio de la conductancia bajo el cambio de la generación, hemos considerado las gráficas de contornos de la transmitancia en el espacio  $(E, k_y)$ . Aquí, nos enfocaremos en las estructuras magnetoelectricas, sin embargo, se puede hacer un análisis similar para las barreras magnéticas. En particular, hemos considerado las generaciones  $N = 5$ ,  $N = 6$  y  $N = 7$  con un ancho inicial  $w = 6 l_B$  y una barrera electrostática  $U = 5E_0$ .

Para correlacionar una a una las curvas de conductancia con los mapas de transmisión, hemos incluido en la misma figura ambas cantidades. En la Fig. 3.9, la columna de la izquierda (Figs. 3.9 (a), (c) y (e)) corresponde a la conductancia, mientras que la columna de la derecha (Figs. 3.9 (b), (d) y (f)) a los mapas de transmisión. Del mismo modo, el primer, segundo y tercer renglón corresponden a las generaciones 5, 6 y 7, respectivamente. Aquí, también es importante mencionar que debido a la altura de la barrera electrostática así como al rango de energía considerado, las oscilaciones de la conductancia están bien resueltas. Para una mejor comprensión, las oscilaciones, específicamente los mínimos, se indican con flechas negras y se marcan con números rojos. Para  $N = 5$  la conductancia

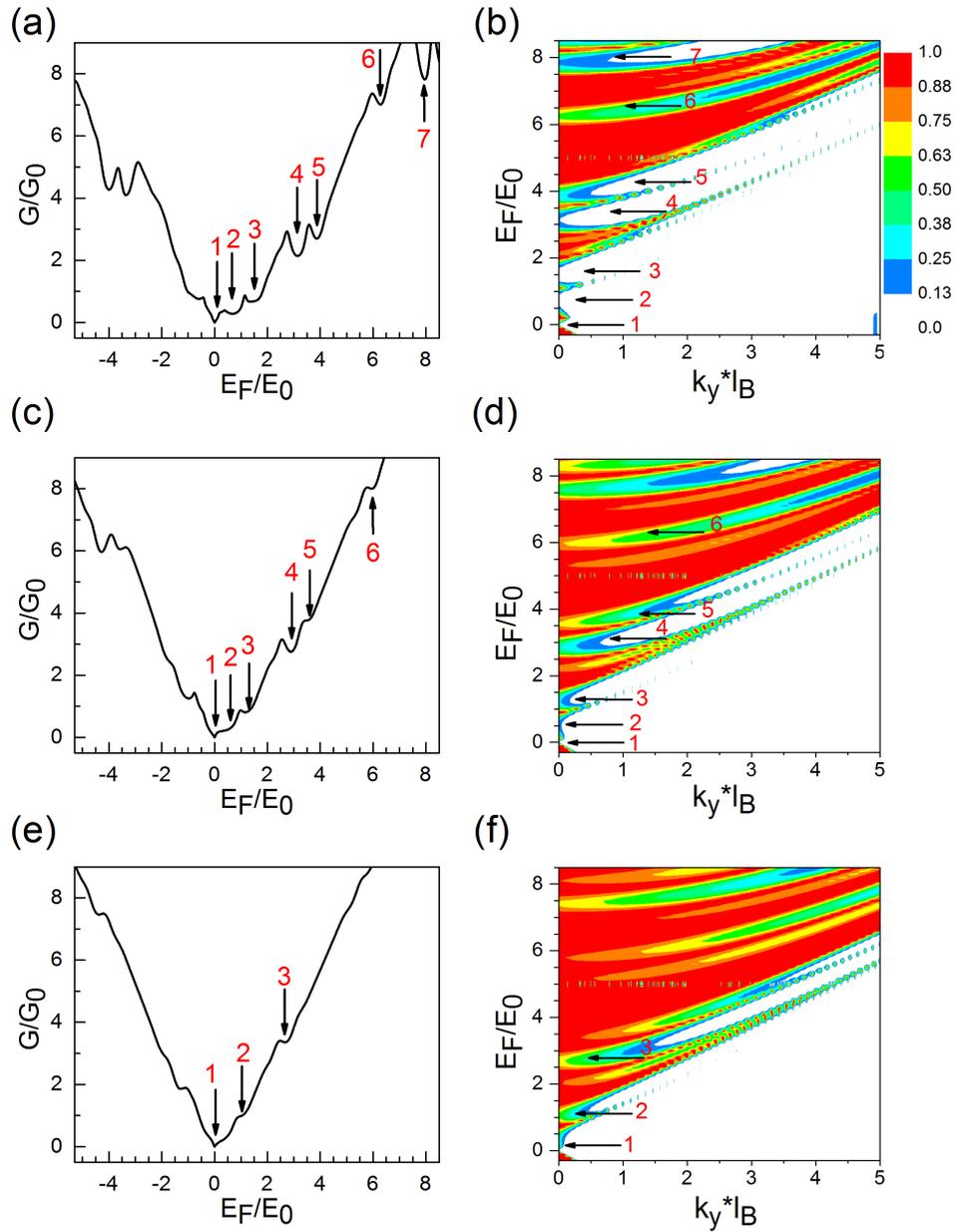


Figura 3.9: Descripción del comportamiento oscilatorio de la conductancia en MECCGs. (a), (c) y (e) representan la conductancia como función de la energía de Fermi y (b), (d) y (f) sus mapas de transmisión correspondientes, respectivamente. El primer, segundo y tercer renglón corresponden a  $N = 5$ ,  $N = 6$  y  $N = 7$ , respectivamente. El ancho inicial es  $w = 6 l_B$ , la intensidad del campo magnético es  $B = 2B_0$  y la barrera electrostática es igual a  $U = 5E_0$ .

tiene siete oscilaciones en el rango de energías positivas, ver Fig. 3.9 (a). Si tenemos en cuenta los mapas de transmisión, las oscilaciones pueden correlacionarse directamente

con las regiones de transmitancia mínima. Por ejemplo, la oscilación de la conductancia etiquetada con el número tres tiene su mínimo cerca de 1.5 en unidades de  $E_F/E_0$ . Este mínimo resulta de la región de baja transmisión que se presenta cerca de esa energía, véase la flecha etiquetada con el número 3 en la Fig. 3.9 (b). Así pues, este tipo de correlación se puede hacer para el resto de las oscilaciones. En el caso de  $N = 6$ , podemos notar que las oscilaciones tienden a reducirse en número y a hacerse menos profundas. Al tomar en cuenta el mapa de transmisión correspondiente, podemos identificar las regiones de baja transmisión que dan lugar a las oscilaciones, los mínimos para ser específicos. Además, si comparamos los contornos de transmisión de  $N = 5$  y  $N = 6$ , podemos darnos cuenta que aparecen más regiones de transmisión alta (áreas rojas) para  $N = 6$ , lo que explica la tendencia en la conductancia. Para  $N = 7$  la conductancia solo tiene tres oscilaciones como resultado de la reducción del ancho de las barreras. Como en los casos de  $N = 5$  y  $N = 6$ , es posible correlacionar las oscilaciones con las regiones de baja transmisión presentadas en los mapas de transmisión. También podemos ver que a medida que la generación aumenta, más y más regiones rojas cubren los contornos de transmisión, reduciendo así las oscilaciones de la conductancia. Por último, es importante destacar que los mapas de transmisión manifiestan la interacción entre los estados propagantes y evanescentes, por esta razón, pueden ser considerados como una herramienta útil para interpretar y comprender las propiedades de transporte.

Para finalizar esta sección, queremos destacar algunos aspectos importantes que, por lo que sabemos, representan problemas abiertos en estructuras de grafeno tipo Cantor:

- La correlación posicional entre los bloques de construcción de estructuras basada en el conjunto Cantor puede proporcionar estados exóticos [61–63]. Por ejemplo, en condiciones estructurales adecuadas, es posible obtener estados extendidos especiales [61,62], así como modos atrapados o similares a solitones [63]. Hasta donde sabemos, los estados mencionados han sido reportados para los electrones de Schrödinger, pero

para los electrones de Dirac representa un problema abierto. Aún más, los posibles efectos que el campo magnético podría infringir en estos estados especiales no se han repostado hasta el momento.

- La fractalidad del espectro de los electrones en las estructuras de grafeno tipo Cantor es otro problema que aún no se aborda. Del mismo modo, si el campo magnético elimina la fractalidad, representa una pregunta sin respuesta. De esta manera, podemos esperar cambios importantes de esta propiedad, la fractalidad, bajo los efectos del campo magnético, ya que la agrupación a tercias de resonancias y subbandas de energía está directamente relacionada con la distribución del conjunto Cantor, y podrían estar conectadas a la fractalidad, la cual ya no se conserva bajo los efectos mencionados.
- Las estructuras tipo Cantor basadas en el grafeno en las que no se conserva el pseudo-espín (no se preserva el tunelamiento Klein) presentan características auto-similares en las propiedades de transmisión con reglas de escala bien definidas [56, 102]. Aquí, es importante mencionar que para los sistemas con barreras electrostáticas, el tunelamiento Klein es un sello distintivo, pero cuando se incorpora el campo magnético, esta característica exótica ya no se conserva. Entonces, éste es también un problema abierto si el campo magnético en nuestro sistema promueve las características auto-similares en las propiedades de transmisión.

### 3.6. Conclusiones

En resumen, hemos estudiado los efectos de la generación en las propiedades de transmisión y transporte de MECGSs. Para investigar las propiedades mencionadas, hemos implementado el método de la matriz de transferencia y el formalismo de Landauer-Büttiker. Comparamos las propiedades de transmisión y transporte de los sistemas con barreras

magnéticas y magnetoeléctricas. Para la transmitancia obtenemos un aumento y un proceso de bifurcación a medida que aumenta la generación. En el caso de la conductancia, obtenemos el comportamiento oscilatorio típico. A medida que la generación aumenta las oscilaciones disminuyen en número y se vuelven menos profundas. Además, para comprender sus particularidades, propusimos e implementamos la gráfica de contorno de la transmitancia en el espacio  $(E, k_y)$  como una herramienta confiable.

---

### Reglas de escala con campo magnético

---

#### 4.1. Introducción

En la naturaleza, muchas características peculiares de ciertos fenómenos son observables solo bajo condiciones especiales. Por ejemplo, recientemente se ha reportado que al romper la simetría de inversión temporal o la simetría de inversión, surgen nuevos materiales tales como los aislantes topológicos [104–106], los semimetales de Dirac [107, 108], los semimetales de Weyl [109, 110] y, además, han surgido materiales con portadores de carga especial como los electrones de Kane [111, 112]. Entonces, parece ser que el conjunto de simetrías en un material (simetrías quirales) y, especialmente, su ruptura (ruptura de simetría quiral) pueden dar lugar a materiales sin precedentes con propiedades exóticas. De hecho, en el grafeno se ha demostrado que la ruptura de la simetría quiral puede cambiar el carácter del material de un semimetálico a un fuerte aislante [113]. Incluso, una fase metálica o superconductora puede ser inducida rompiendo alguna simetría quiral

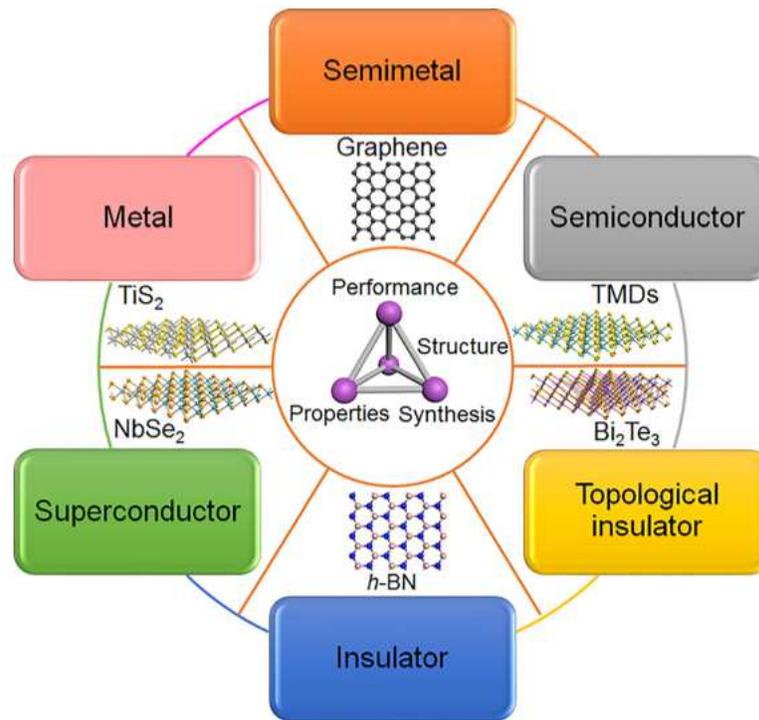


Figura 4.1: Familia de materiales bidimensionales, normalmente conocidos como materiales de una sola capa.

particular. En realidad, si tenemos en cuenta la variedad de los materiales 2D disponibles (Fig. 4.1) en la actualidad así como las posibilidades de ruptura de alguna de las simetrías, resulta que las oportunidades para los materiales exóticos son numerosas.

Por otro lado, la naturaleza bidimensional del grafeno constituye una plataforma sin precedentes para estudiar las propiedades de transmisión y transporte en geometrías especiales (auto-similares) como aquellas que se pueden construir utilizando la distribución de la carpeta de Sierpinski, ya sea por medio de contactos metálicos (Fig. 4.2) o por nanohoyos (Fig. 4.3). Otro ejemplo, puede ser el triángulo de Sierpinski, formada también por contactos metálicos (Fig. 4.4) así como el conjunto de Cantor, etc. En principio, estas geometrías peculiares se pueden obtener mediante un proceso de nano-estructuración del material. De hecho, es posible obtener perfiles de potenciales con características auto-similares. Incluso, los perfiles pueden tener escalas tanto en el eje espacial como en el

energético. Estos perfiles de potencial auto-similar se propusieron originalmente en el contexto de pozos cuánticos semiconductores [114,115]. En realidad, en el grafeno tenemos varios mecanismos para la nano-estructuración. Entre los más relevantes podemos encontrar los basados en electrodos metálicos [116–119], sustratos interactuantes [120–123], tensión [124–126] y puertas ferromagnéticas [59, 64–70]. Todos estos mecanismos modifican las propiedades fundamentales del grafeno. Por ejemplo, si tenemos grafeno en un sustrato que interactúa, como SiC o hBN, la relación de dispersión se modifica y, lo que es más importante, se induce un bandgap. La interacción de la sábana de grafeno con el sustrato rompe la simetría intrínseca de las sub-redes en el grafeno y, en consecuencia, surge una apertura de banda prohibida o comúnmente llamada como bandgap. Además, como resultado de la ruptura de la simetría, el pseudo-espín ya no se conserva evitando el tunelamiento Klein [16,17]. En el caso de puertas metálicas y ferromagnéticas, los campos eléctricos y magnéticos asociados desplazan los conos Dirac del grafeno en los ejes de energía y del vector de onda, respectivamente. En el caso del campo magnético, éste también rompe una simetría fundamental, específicamente la simetría de inversión temporal.

En este contexto, el carácter relativista de los portadores de carga en grafeno, las propiedades exóticas que pueden surgir debido a la ruptura de simetrías y las geometrías especiales que pueden imponerse al grafeno y a otros materiales 2D mediante nano-estructuración, pueden confabularse para dar lugar a propiedades de transmisión y transporte sin precedentes. Hasta donde sabemos, el transporte auto-similar constituye otro fenómeno de transporte exótico en el grafeno, ya que éste es el único material en el que las características geométricas complejas impactan directamente en las propiedades físicas medibles. De hecho, en los últimos años, se ha informado acerca de la transmisión y el transporte auto-similares en estructuras de grafeno tipo Cantor [56, 102, 127, 128]. Los patrones de transmitancia y conductancia auto-similares encontrados obedecen a reglas de escala bien definidas, es decir, se pueden conectar patrones para diferentes tamaños del sistema. El

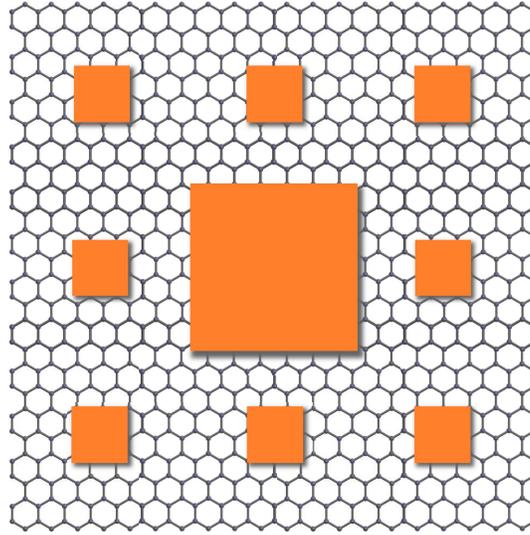


Figura 4.2: Contactos metálicos depositados sobre grafeno distribuidos acorde a las reglas fundamentales de la carpeta de Sierpinski.

tamaño del sistema en las coordenadas de energía y espacio se puede controlar mediante la generación y el ancho efectivo del sistema, así como la altura de las barreras. En realidad, las reglas de escala corresponden precisamente a esos parámetros. Otro aspecto importante a destacar es que para obtener los patrones auto-similares mencionados es fundamental que se rompa la simetría de las sub-redes, estructuras con sustratos interactuantes. Porque, hasta donde hemos corroborado, las características auto-similares no están presentes en las estructuras en las que se conserva la simetría de las sub-redes [102], estructuras en las que las barreras de energía se generan por electrodos metálicos.

En este trabajo, estudiamos la auto-similitud y escalamiento en las propiedades de transmisión de estructuras de grafeno tipo Cantor bajo los efectos magnetoeléctricos, MECGSs. En concreto, exploramos las consecuencias de la ruptura de la simetría de inversión temporal. Con el fin de inducir la ruptura de la simetría de inversión temporal y al mismo tiempo obtener una estructura auto-similar (tipo Cantor), hemos considerado que las barreras de energía que componen la estructura son generadas por campos magnéticos y eléctricos. El campo magnético nos asegura la ruptura de la simetría de inversión tem-

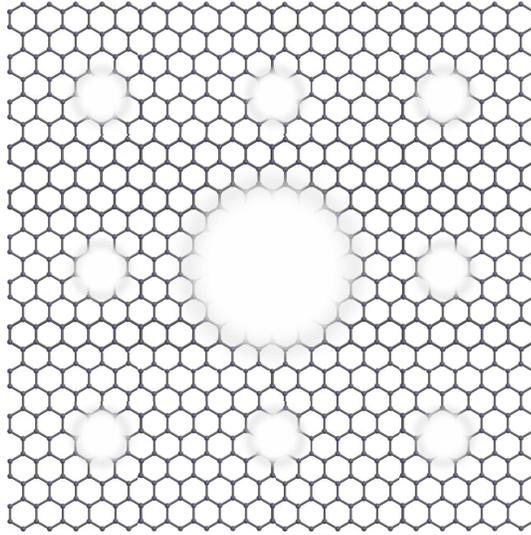


Figura 4.3: Nano-hoyos distribuidos en tamaños y números acorde a las reglas fundamentales de la carpeta de Sierpinski.

poral. La ecuación de tipo Dirac y el enfoque de la matriz de transferencia se implementan para describir los portadores de carga y para obtener las propiedades de transmisión, respectivamente. Obtenemos que una vez que se incorpora el campo magnético, los patrones de transmisión muestran características auto-similares. Aún más importante, obtenemos reglas de escala que pueden describir los patrones de transmisión auto-similares a diferentes escalas. Hasta donde sabemos, esta es la primera vez que las reglas de escalamiento se reportan bajo los efectos del campo magnético.

## 4.2. Motivación

Recientemente, se ha estudiado el transporte cuántico en sistemas basados en grafeno recurriendo a estructuras complejas como lo es la carpeta de Sierpinski. La dimensión fractal de las fluctuaciones de la conductancia cuántica ha sido calculada para diferentes iteraciones, es decir, para distintas geometrías de la carpeta de Sierpinski. El resultado principal radica en el hecho de que la dimensión fractal de las fluctuaciones es aproximadamente igual a la dimensión fractal de la carpeta de Sierpinski en cuestión [129]. En otras

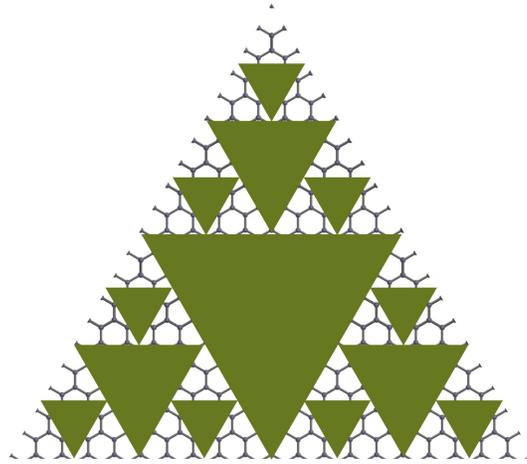


Figura 4.4: Triángulo de Sierpinski generado por contactos metálicos depositados sobre grafeno.

palabras, la dimensión de la carpeta determina la dimensión de las fluctuaciones, siendo este comportamiento una propiedad intrínseca de la geometría de las carpetas. Estos resultados motivan el estudio de propiedades de transporte en dispositivos fractales planos, que recién están siendo puestos a disposición gracias al progreso en la nano-fabricación. Por último, se ha demostrado una vez más que las propiedades geométricas de la estructura compleja impactan, en cierto modo, en las propiedades físicas medibles.

### 4.3. Objetivos

El objetivo principal, de este cuarto y último capítulo, es investigar la auto-similitud y escalamiento en las propiedades de transmisión de los electrones de Dirac a través de estructuras de grafeno tipo Cantor bajo efectos magnetoeléctricos. Por lo tanto, fijaremos los siguientes puntos concretos:

- Buscar patrones auto-similares en los espectros de transmisión en función de la variación de cada uno de los parámetros fundamentales como los son el número de generación  $N$ , la altura de las barreras  $V_0$  y longitud del sistema  $w$ .
- Describir el escalamiento con ayuda de expresiones matemáticas bien definidas que

relacionen la auto-similitud de los patrones de transmisión con respecto a los tres parámetros fundamentales  $N$ ,  $V_0$  y  $w$ .

## 4.4. Metodología

Como se mencionó en la sección previa, es posible crear geometrías especiales utilizando como material anfitrión el grafeno y ciertas estructuras tipo fractales como la carpeta de Sierpinski, el triángulo de Koch, etc. En esta misma dirección, implementamos la secuencia del conjunto Cantor para la distribución de las barreras de potencial, ver Fig. 4.5, solo que a diferencia de los sistemas propuestos en las Figs. 4.2, 4.3 y 4.4 nosotros realizamos un estudio de un problema unidimensional. Al igual que en los capítulos anteriores, se utiliza una ecuación de tipo Dirac y el método de la matriz de transferencia para determinar la dinámica y transmitancia de los portadores de carga. Las características principales de nuestro sistema de interés ya se dieron a conocer en el capítulo 3, por esta razón ya no se abordarán aquí, para mayores detalles véase la sección de metodología del capítulo previo.

## 4.5. Resultados

Con el formalismo anterior en mente, tenemos la posibilidad de abordar nuestro objetivo central, que es explorar las relaciones de escalamiento para los patrones de transmisión auto-similares. En particular, implementamos reglas de escala para dos parámetros principales: la generación  $N$  y la longitud del sistema  $w$ .

Primero, comenzamos comparando las curvas de transmisión entre dos generaciones consecutivas. Esto con el objetivo de averiguar si en realidad existe auto-similitud entre generaciones. A este respecto, la Fig. 4.6 (a) muestra la transmitancia como función de la energía para los electrones de Dirac con incidencia oblicua ( $\theta = \pi/4$ ). Aquí las líneas sólidas en color negro y las discontinuas en rojo corresponden a las generaciones  $N = 7$

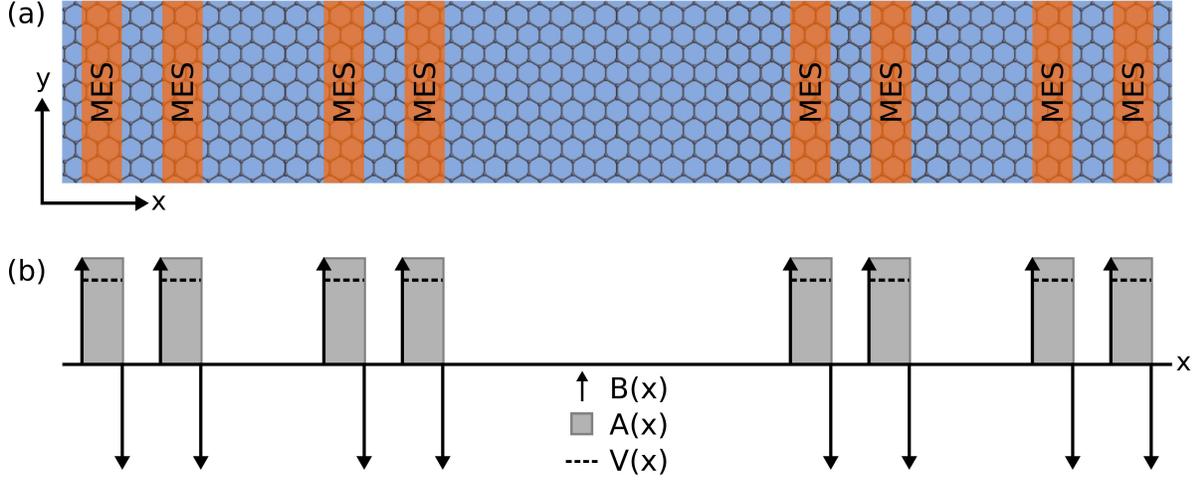


Figura 4.5: (a) Representación esquemática de la vista superior de una estructura basada en grafeno tipo Cantor bajo efectos magnetoeléctricos. El grafeno se coloca en un sustrato que no interactúa, como  $\text{SiO}_2$  (área sombreada en azul). Las tiras magnetoeléctricas (MESs) se incorporan en la parte superior del grafeno para ajustar la distribución y la forma de los campos magnéticos y eléctricos aplicados perpendicularmente al grafeno y, en consecuencia, el perfil de las barreras magnetoeléctricas. (b) Perfiles del potencial vectorial y escalar correspondientes para (a). El campo magnético deltaico se representa con flechas hacia arriba y abajo.

y  $N = 8$ , respectivamente. El resto de los parámetros estructurales son fijos, como la intensidad del campo magnético  $B = 2B_0$ , la intensidad del campo eléctrico  $U_0 = 2E_0$  y la longitud del sistema  $w = 20 l_B$ . De la figura se puede ver que las curvas de transmisión están perfectamente correlacionadas y solo difieren en sus amplitudes. Por lo tanto, es probable que la transformación de escalamiento esté solamente aumentando a una cierta potencia. Específicamente, proponemos la relación,

$$T_N(E) \approx [T_{N+1}(E)]^2. \quad (4.1)$$

Luego, para probar esta expresión, simplemente designamos  $T_7$  y  $T_8$  como la curva de referencia y la curva escalada, respectivamente. Por lo tanto, la ec. (4.1) toma la forma  $T_7(E) \approx [T_8(E)]^2$ . El escalamiento resultante se muestra en la Fig. 4.6 (b), donde podemos observar que la curva escalada (líneas punteadas azules) tiene una excelente coincidencia con respecto a la curva de referencia (líneas continuas negras). Por tanto, resulta que

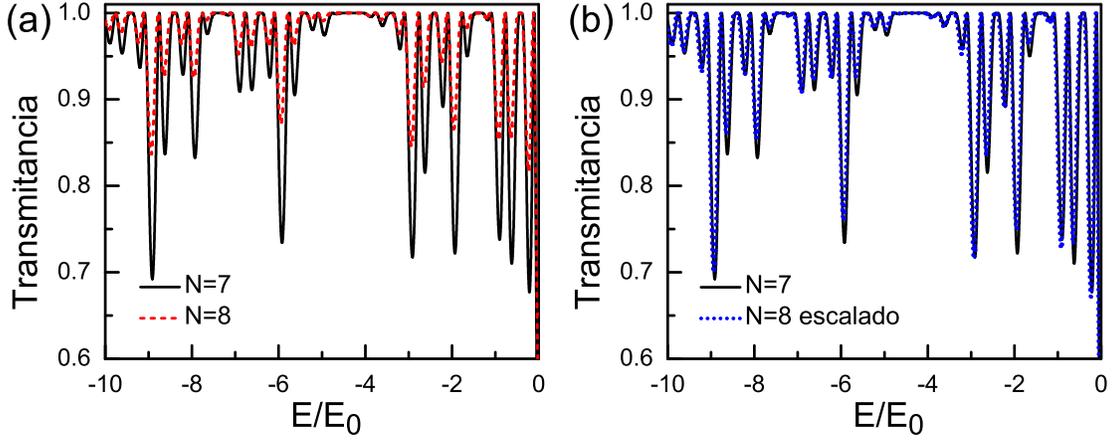


Figura 4.6: Escalamiento entre generaciones. (a) Transmitancia como función de la energía para las generaciones  $N = 7$  (líneas continuas negras) y  $N = 8$  (líneas discontinuas rojas). (b) Lo mismo que en (a) pero aquí la generación  $N = 8$  (líneas punteadas azules) se escala de acuerdo con la ec. (4.1). En este caso, la curva escalada se parece bastante bien a la de referencia ( $N = 7$ ). Los parámetros estructurales son  $B = 2B_0$ ,  $U_0 = 2E_0$  y  $w = 20 l_B$ .

nuestra expresión propuesta conecta de manera adecuada las curvas auto-similares y, por ende, describe efectivamente la escalabilidad que hay entre generaciones.

En el caso de la longitud del sistema, encontramos que cuando se tratan dos estructuras con diferentes longitudes, los patrones de transmitancia tienen características auto-similares, véase la Fig. 4.7 (a). En este caso, hemos considerado dos longitudes  $w = 20 l_B$  y  $w = 10 l_B$ , líneas continuas negras y líneas discontinuas rojas, respectivamente. El resto de los parámetros son los mismos que en la Fig. 4.6, excepto que aquí la generación  $N = 8$  permanece fija. Igual que para el caso del escalamiento entre generaciones, necesitamos aplicar alguna transformación para poder reproducir la curva de referencia por medio de la escalada. La transformación correspondiente que estamos proponiendo es,

$$T_w(E) \approx [T_{\frac{1}{\alpha}w}(\frac{1}{\alpha}E)]^{\alpha^2}, \quad (4.2)$$

donde  $w$  indica la longitud del sistema y  $\alpha$  es el factor que conecta las longitudes de ambas estructuras: la estructura de referencia y la escalada.

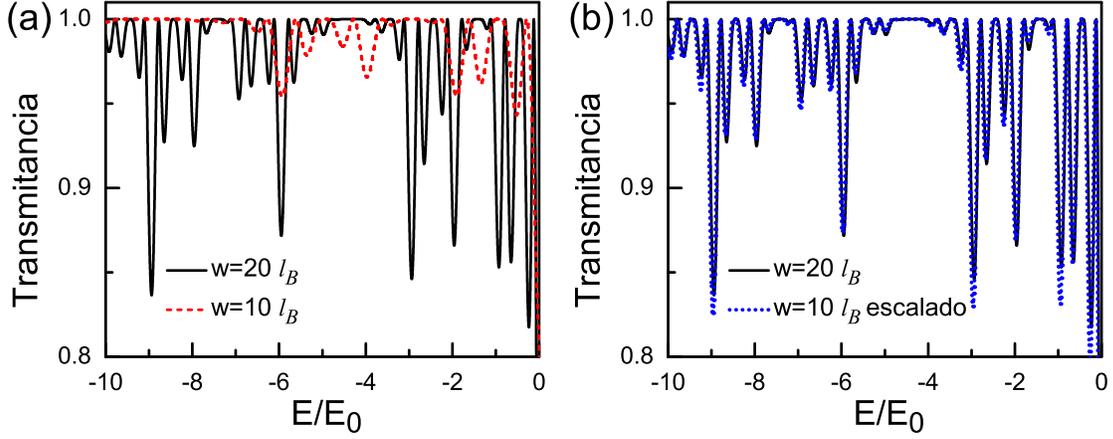


Figura 4.7: Escalamiento entre longitudes. (a) Transmitancia como función de la energía para longitudes  $w = 20 l_B$  (líneas continuas negras) y  $w = 10 l_B$  (líneas discontinuas rojas). (b) Lo mismo que en (a) pero aquí la longitud  $w = 10 l_B$  (líneas discontinuas azules) se escala de acuerdo con la ec. (4.2). La curva escalada es muy similar a la referencia ( $w = 10 l_B$ ). Los parámetros estructurales son  $N = 8$ ,  $B = 2B_0$  y  $U_0 = 2E_0$ .

Al aplicar la ec. (4.2) a nuestros resultados particulares, obtenemos la expresión  $T_{20l_B}(E) \approx [T_{10l_B}(\frac{1}{2}E)]^4$ . Como podemos observar, se necesitan dos transformaciones para este tipo de escalamiento. La primera transformación modifica el eje de transmisión o transmitancia elevándolo a la cuarta potencia, mientras que la segunda implica reducir en un factor a 2 el eje de la energía. El resultado de estas transformaciones se muestra en la Fig. 4.7 (b), donde las líneas punteadas azules corresponden a la curva escalada, mientras que las líneas sólidas negras representan la curva de referencia. Comparando ambas curvas de transmisión, podemos apreciar que estas curvas coinciden bastante bien. A pesar de las dos transformaciones involucradas, podemos decir que una vez más nuestra regla de escala entre longitudes funciona correctamente.

Las expresiones de escalamiento presentadas anteriormente, ec. (4.1) y ec. (4.2), también se pueden combinar para proporcionar una regla que involucre tanto a la generación como a la longitud. Esta regla de escala general viene dada como,

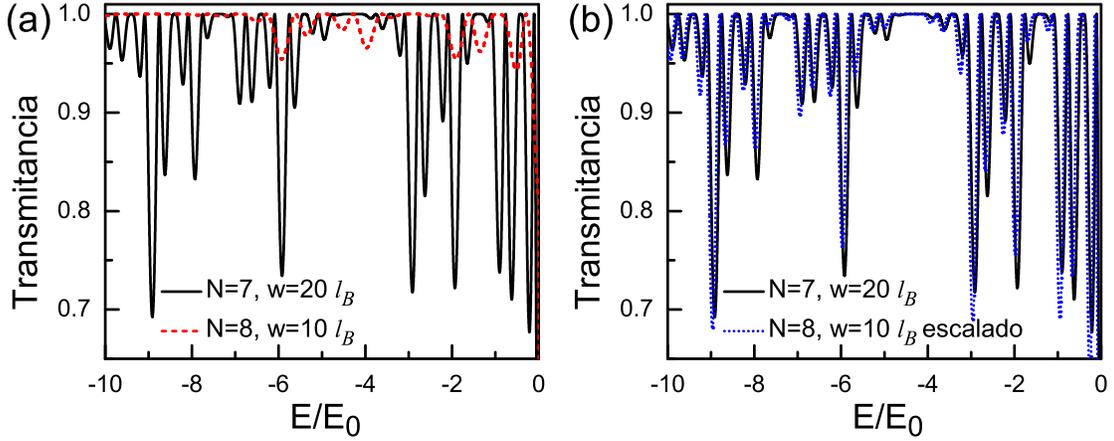


Figura 4.8: Escalamiento general. (a) Transmisión en función de la energía para  $N = 7$  y  $w = 20 l_B$  (líneas continuas negras) y  $N = 8$  y  $w = 10 l_B$  (líneas discontinuas rojas). (b) Lo mismo que en (a) pero aquí la curva escalada (líneas punteadas azules) se calcula de acuerdo con la ec. (4.3). La curva escalada es muy similar a la de referencia (líneas continuas negras). Los parámetros estructurales son  $B = 2B_0$ ,  $U_0 = 2E_0$  y  $\theta = \pi/4$ .

$$T(E, N, w) \approx [T(\frac{1}{\alpha}E, N + m, \frac{1}{\alpha}w)]^{2^m(\alpha)^2}, \quad (4.3)$$

donde  $m$  es la diferencia entre generaciones y  $\alpha$  es el valor que conecta la relación entre las longitudes de los sistemas. De acuerdo con este escalamiento general, podemos comparar dos curvas de transmisión con generaciones no consecutivas y diferentes longitudes. A pesar de los dos parámetros implicados en la regla general así como las generaciones no consecutivas, es posible obtener un escalamiento muy bueno entre los patrones de transmisión, ver Fig. 4.8.

Para tener un análisis cuantitativo entre las curvas de transmisión auto-similares, se consideró un estudio de la desviación cuadrática media (rmsd). El rmsd arroja un valor numérico que indica cuantitativamente cuán similares son las curvas escaladas y de referencia. Si el rmsd tiende a cero, significa que la coincidencia entre las curvas es bastante buena. Para el escalamiento entre generaciones y longitudes, los valores de rmsd son  $2.4755251\text{E-}02$  y  $1.3045051\text{E-}02$ , respectivamente. Por lo tanto, como podemos ver, el

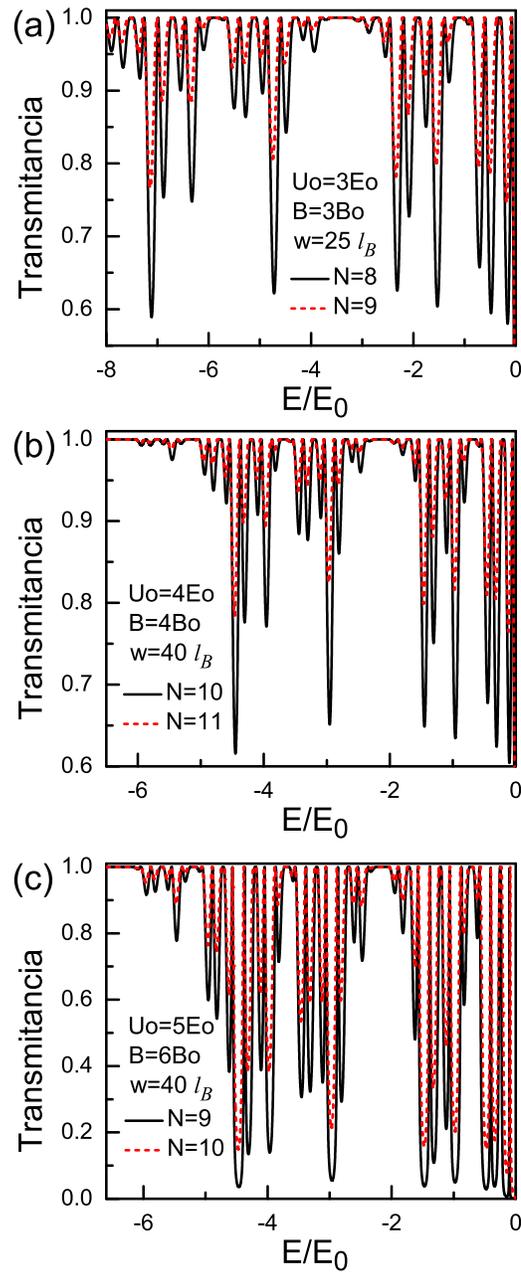


Figura 4.9: Patrones de transmisión para diferentes alturas de las barreras electrostáticas: (a)  $U_0 = 3E_0$ , (b)  $U_0 = 4E_0$  y (c)  $U_0 = 5E_0$ . Para tener patrones de transmisión auto-similares la longitud del sistema y la intensidad del campo magnético necesitan ser ajustadas. De hecho, en (a)  $w = 25 l_B$  y  $B = 3B_0$ , mientras que en (b)  $w = 40 l_B$  y  $B = 4B_0$  y en (c)  $w = 40 l_B$  y  $B = 6B_0$ . Igualmente, las generaciones de la estructura auto-similar necesita ser ajustada, ver la diferencia entre (a), (b) y (c). El ángulo de incidencia en todos los casos es el mismo,  $\theta = \pi/4$ .

mejor escalamiento se produce entre longitudes.

Por último, pero no menos importante, queremos abordar algunos puntos que consideramos relevantes para tener una mejor comprensión de los patrones auto-similares de transmisión. El primero está relacionado con el hecho de que el escalamiento solo se presenta para los huecos, véase el eje de energía en todas las figuras. En las estructuras basadas en grafeno, es bien sabido que los electrones y huecos responden de diferentes maneras a los campos magnéticos. Sin embargo, no tenemos una respuesta definitiva acerca de por qué solo el espectro de los huecos manifiesta patrones auto-similares. Aún más interesante, si la polaridad del campo magnético se invierte, los patrones auto-similares surgirán en el espectro de electrones. Además, si cambiamos la altura de las barreras electrostáticas, es necesario ajustar la longitud del sistema así como también modificar la intensidad del campo magnético para tener patrones auto-similares.

El segundo aspecto que es importante comentar es acerca de la intensidad del campo magnético en el que se producen los patrones auto-similares. De hecho, para todos nuestros resultados, el campo magnético crítico toma un valor de  $2B_0$ . Esto parece ser un valor especial para nuestra estructura. Sin embargo, para campos magnéticos más grandes, los patrones de transmisión se desplazan tanto en el eje de la transmisión como de la energía, manteniendo la envolvente de las curvas. Entonces, es posible que otras reglas de escalamiento, en las que se involucre la intensidad del campo magnético, describan estos patrones de transmisión. En la Fig. 4.9 mostramos los resultados correspondientes para: (a)  $U_0 = 3E_0$ , (b)  $U_0 = 4E_0$  y (c)  $U_0 = 5E_0$ . En el primer caso  $U_0 = 3E_0$ , necesitamos ajustar  $w$  y  $B$  a  $w = 20 l_B$  y  $3B_0$ , respectivamente; mientras que para  $U_0 = 4E_0$  estos parámetros tiene la necesidad de adoptar los valores  $w = 40 l_B$  y  $4B_0$ ; y para el tercero caso  $U_0 = 5E_0$ , la longitud del sistema y la intensidad del campo magnético requeridos son  $w = 40 l_B$  y  $6B_0$ , respectivamente. Aquí, también es importante mencionar que las generaciones de la estructura auto-similar necesitan ser ajustadas al mismo tiempo. De hecho, para (a), (b) y (c) los patrones de transmisión auto-similar se presentan para  $N = 8$  y  $N = 9$ ,

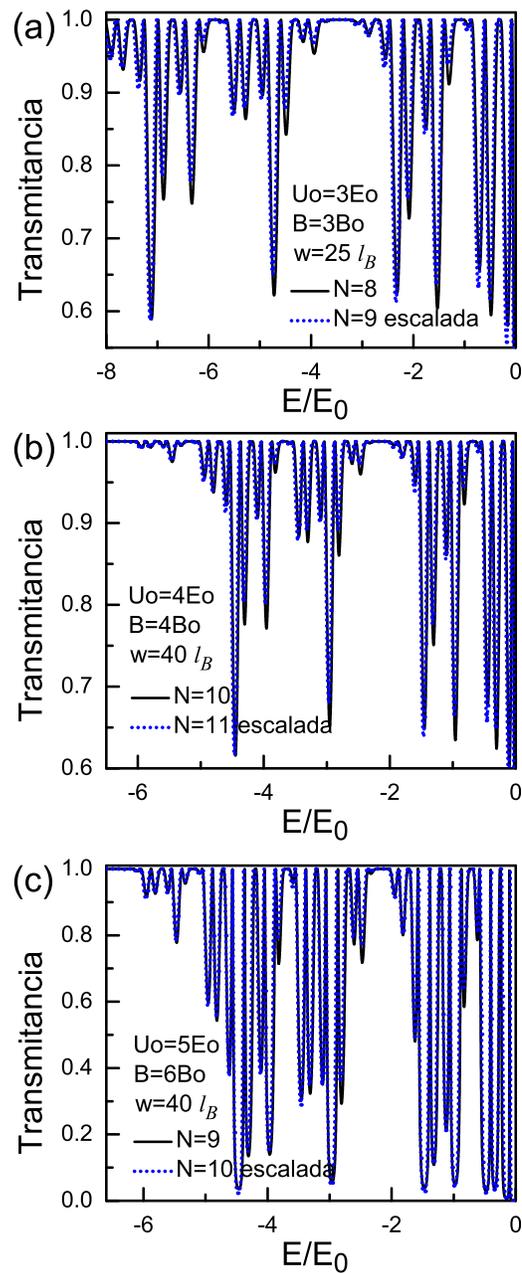


Figura 4.10: Lo mismo que en la Fig. 4.9, solo que aquí el escalamiento entre generaciones ha sido aplicado mediante la ec. (4.1). Como podemos ver, esta regla se cumple bien independientemente de la altura de la barrera electrostática.

$N = 10$  y  $N = 11$ , y  $N = 9$  y  $N = 10$ , respectivamente. Esto es bastante relevante porque la interacción entre estos parámetros determinará las características de los patrones de transmisión. Desde el punto de vista experimental también es preponderante porque nece-

sitamos elegir valores accesibles para la intensidad del campo electrostático, la intensidad del campo magnético y la longitud del sistema que garantizan patrones de transmisión auto-similares. Asimismo, es importante señalar que la regla de escala entre generaciones permanece igual independientemente de la altura de las barreras electrostáticas, ver Fig. 4.10.

## 4.6. Conclusiones

En resumen, hemos investigado las propiedades de transmisión auto-similares en estructuras basadas en grafeno tipo Cantor. La ecuación tipo Dirac y el enfoque de matriz de la transferencia se implementaron para describir los portadores de carga en grafeno y para obtener las propiedades de transmisión, respectivamente. Con base a nuestros resultados, obtuvimos que una vez que se incorpora el campo magnético, surgen patrones auto-similares en la transmitancia. Además, estos patrones obedecen reglas de escala bien definidas que tienen en cuenta la conexión entre patrones a diferentes generaciones y longitudes del sistema. Finalmente, es importante observar que el carácter relativista de los portadores de carga, la ruptura de simetría de la inversión temporal y la nanoestructuración especial del material se confabulan para dar lugar a estas propiedades de transmisión tan peculiares. Nuestros resultados también respaldan la idea de que la ruptura de cierta simetría es fundamental para obtener propiedades de transmisión y transporte auto-similares en grafeno [102, 128].



## CAPÍTULO 5

---

### Conclusiones

---

En esta tesis, nos enfocamos en el estudio de las propiedades de los electrones de Dirac en estructuras basadas en grafeno tipo Cantor (CGSs). En particular, investigamos dos temas específicos: 1) las propiedades de transmisión y transporte en CGSs y 2) las peculiaridades de la auto-similitud y escalamiento en CGSs. Además, cada uno de estos temas han sido abordados para tres CGSs distintas. En cada uno ellos las barreras de potencial se generan aplicando diferentes mecanismos: i) por sustratos nano-estructurados, ii) campo electrostático y iii) efectos magnéticos. Donde cada uno de estos sistemas acarrea sus propias peculiaridades sobre las características del grafeno y sus portadores de carga. El método de la matriz de transferencia ha sido implementado para indagar las propiedades de transmisión mientras que el formalismo de Landauer-Büttiker es ajustado para analizar las propiedades de transporte.

En primera instancia, hemos tomado en cuenta las propiedades de transmisión y transporte en CGSs formadas por sustratos nano-estructurados (SCGSs) y potenciales elec-

trostáticos (ECGSs). Hemos obtenido que el tunelamiento Klein y el efecto de colimación predominan en ECGSs, mientras que en el caso de SCGSs se manifiestan rasgos auto-similares. Además, se presta especial atención en la naturaleza oscilatoria de la conductancia y su relación con el espectro de los estados acotados. Obtenemos agrupamientos de tres subbandas que se degeneran en ECGSs y se degeneran y ocluyen en SCGSs. Además, estas subbandas describen, a través de la apertura y el cierre-apertura de las mismas, la forma y ubicación de los picos de la conductancia. En segunda instancia, investigamos el comportamiento auto-similar de los espectros de transmisión, y lo más importante, hemos calculado la escalabilidad de dichos espectros. Para ello, hemos propuesto e implementado reglas de escala que describen en gran forma los espectros de transmisión a diferentes escalas. Adicionalmente, estas reglas de escalamiento son válidas para incidencia tanto normal como oblicua. En general, los ingredientes básicos para obtener características auto-similares son: electrones de Dirac relativistas, una estructura auto-similar y la no conservación del pseudo-espín, ingredientes válidos para SCGSs.

En tercera instancia, estudiamos las propiedades de transmisión y transporte en una CGSs bajo los efectos magnetoeléctricos (MECGSs). En nuestros resultados encontramos que la conductancia presenta un comportamiento oscilatorio. Además, logramos describir y entender los picos que dan lugar a las oscilaciones a través de los contornos de la transmitancia en el espacio  $(E, k_y)$ . Por lo tanto, podemos asociar las características de los picos, como la forma y la ubicación, con este tipo de gráficos. Del mismo modo, al aumentar la generación del sistema, se mejora la conductancia, las oscilaciones se reducen y son menos pronunciadas. De esta manera, la modulación magnetoeléctrica y el orden fractal resultan útiles para controlar las propiedades de transmisión y transporte en CGSs. En última instancia, encontramos que los efectos del campo magnético inducen patrones auto-similares en las propiedades de transmisión, esto gracias a que el campo magnético rompe la simetría de inversión temporal. Asimismo, estos patrones se pueden reproducir mediante expresiones matemáticas de escalamiento bien definidas.

---

En general, estos resultados coadyuvan a un mejor entendimiento de las propiedades de transmisión y transporte en sistemas auto-similares en grafeno. Igualmente, esperamos que estas propiedades de transmisión y transporte exóticas en grafeno estimulen a nuestra contraparte experimental y algún día puedan ser corroboradas a nivel experimental. Finalmente, podemos afirmar que las propiedades físicas heredan, bajos los efectos de sustratos nano-estructurados y magneto-eléctricos, las propiedades geométricas (auto-similitud) del sistema.



## CAPÍTULO 6

---

### Perspectivas

---

Enseguida se indican ciertas perspectivas derivadas del trabajo de tesis doctoral.

- Estudiar las reglas de escala en las propiedades de transporte, como lo es la conductancia, primero bajo el mecanismo de sustratos nano-estructurados y en segundo, empleando campo eléctrico y magnético.
- Implementar el análisis de auto-similitud y escalamiento en otra clase de materiales bidimensionales tales como el siliceno, fosforeno, etc.



---

## Bibliografía

---

- [1] L. Esaki and R. Tsu, *IBM J. Res. Develop.* **14** (1970) 61.
- [2] L. Esaki and R. Tsu, *Appl. Phys. Lett.* **22** (1973) 562.
- [3] H. T. Grahn, *Semiconductor Superlattices: Growth and Electronic Properties* (World Scientific, Singapore, 1995).
- [4] E. Maciá, *Rev. Prog. Phys.* **69** (2006) 397.
- [5] E. Maciá, *Rep. Prog. Phys.* **75** (2012) 036502.
- [6] R. Pérez-Álvarez, F. García-Moliner, and V. R. Velasco, *J. Phys. Condens. Matter* **13** (2001) 3689.
- [7] J. Feder, *Fractals* (Plenum Press, New York, 1988).
- [8] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Mrozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Science* **306** (2004) 666.
- [9] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, *Nature* **438** (2005) 197.

- 
- [10] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, *Nature* **438** (2005) 201.
- [11] V. P. Gusynin and S. G. Sharapov, *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 146801.
- [12] E. McCann and V. I. Falko, *Phys. Rev. Lett.* **96** (2006) 086805.
- [13] N. M. R. Peres, F. Guinea, and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. B* **73** (2006) 125411.
- [14] A. Calogeracos and N. Dombey, *Contemp. Phys.* **40** (1999) 313.
- [15] C. Itzykson and J.-B. Zuber, *Quantum Field Theory* (Dover, New York, 2006).
- [16] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Nat. Phys.* **2** (2006) 620.
- [17] P. E. Allain and J. N. Fuchs, *Eur. Phys. J. B* **83** (2011) 301.
- [18] B. Trauzettel, Y. M. Blanter, and A. F. Morpurgo, *Phys. Rev. B* **75** (2007) 035305.
- [19] T. M. Rusin and W. Zawadzki, *Phys. Rev. B* **76** (2007) 195439.
- [20] T. M. Rusin and W. Zawadzki, *Phys. Rev. B* **80** (2009) 045416.
- [21] E. Jung, D. Park, and C. -S. Park, *Phys. Rev. B* **87** (2013) 115438.
- [22] A. V. Shytov, M. I. Katsnelson, and L. S. Levitov, *Phys. Rev. Lett.* **99** (2007) 246802.
- [23] A. Shytov, M. Rudner, N. Gu, M. Katsnelson, and L. Levitov, *Solid State Commun.* **149** (2009) 1087.
- [24] Y. Wang, D. Wong, A. V. Shytov, V. W. Brar, S. Choi, Q. Wu, H. -Z. Tsai, W. Regan, A. Zettl, R. K. Kawakami, S. G. Louie, L. S. Levitov, and M. F. Crommie, *Science* **340** (2013) 734.
- [25] S. H. R. Sena, J. M. Pereira Jr., G. A. Farias, M. S. Vasconcelos, and E. L. Albuquerque, *J. Phys.: Condens. Matter* **22** (2010) 465305.

- 
- [26] S. Mukhopadhyay, R. Biswas, and C. Shina, *Phys. Status Solidi B* **247** (2010) 342.
- [27] P. -L. Zhao and X. Chen, *Appl. Phys. Lett.* **99** (2011) 182108.
- [28] A. N. Korol and V. N. Isai, *Phys. Solid State* **55** (2013) 2596.
- [29] W. -T. Lu, S. -J. Wang, Y. -L. Wang, H. Jiang and W. Li, *Phys. Lett. A* **377** (2013) 1368.
- [30] T. Ma, C. Liang, L. -G. Wang, and H. -Q. Lin, *Appl. Phys. Lett.* **100** (2012) 252402.
- [31] Z. Zhang, H. Li, Z. Gong, Y. Fan, T. Zhang, and H. Chen, *Appl. Phys. Lett.* **101** (2012) 252104.
- [32] Y. Xu, J. Zou, and G. Jin, *J. Phys.: Condens. Matter* **25** (2013) 245301.
- [33] H. Huang, D. Liu, H. Zhang, and X. Kong, *J. Appl. Phys.* **113** (2013) 043702.
- [34] C. Li, H. Cheng, R. Chen, T. Ma, L. -G. Wang, Y. Song and H. -Q. Lin, *Appl. Phys. Lett.* **103** (2013) 172106.
- [35] H. Liu, H. Zhang, D. Liu and X. Kong, *J. Appl. Phys.* **114** (2013) 163715.
- [36] A. N. Korol, *Low Temp. Phys.* **40** (2014) 251.
- [37] L. Sun, C. Fang, Y. Song, and Y. Guo, *J. Phys.: Condens. Matter* **22** (2010) 445303.
- [38] Y. -P. Zhang, Y. Gao, and H. -Y. Zhang, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **45** (2012) 055101.
- [39] D. Liu and H. Zhang, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **47** (2014) 185301.
- [40] X. Chen, P. -L. Zhao, and Q. -B. Zhu, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **46** (2013) 015306.
- [41] J. Viana Gomes and N. M. R. Peres, *J. Phys.: Condens. Matter* **20** (2008) 325221.
- [42] Y. -P. Zhang, Y. -H. Yin, H. -H. Lv, *Phys. Lett. A* **378** (2014) 1413.

- 
- [43] Y. -P. Zhang, Y. -H. Yin, H. -H. Lü and H. -Y. Zhang, *Chin. Phys. B* **23** (2014) 027202.
- [44] P. Yeh, *Optical Waves in Layered Media* (Wiley-Interscience, Hoboken, NJ, 2005).
- [45] P. Markos and C. M. Soukoulis, *Wave Propagation: From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials* (Princeton University Press, Princeton, NJ, 2008).
- [46] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1995).
- [47] I. Rodríguez-Vargas, J. Madrigal-Melchor, and O. Oubram, *J. Appl. Phys.* **112** (2012) 073711.
- [48] J. A. Briones-Torres, J. Madrigal-Melchor, J. C. Martínez-Orozco and I. Rodríguez-Vargas, *Superlattices and Microstructures* **73** (2014) 98.
- [49] V. H. Carrera-Escobedo, J. R. Suárez-López, J. C. Martínez-Orozco, J. Madrigal-Melchor and I. Rodríguez-Vargas, *Physica E* **63** (2014) 248.
- [50] V. V. Mitin, V. A. Kochelap, and M. A. Strocio, *Quantum Heterostructures: Microelectronics and optoelectronics* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1999).
- [51] C. Eloy, *Phys. Rev. Lett.* **107** (2011) 258101.
- [52] J. Harte, A. Kinzig, and J. Green, *Science* **284** (1999) 334.
- [53] A. L. Goldberger, D. R. Rigney, and B. J. West, *Investigación y Ciencia* **163** (1990) 30-38.
- [54] F. Miyamaru, Y. Saito, M. W. Takeda, L. Liu, B. Hou, W. Wen, and Ping Sheng, *Appl. Phys. Lett.* **95** (2009) 221111.

- 
- [55] A. V. Lavrinenko, S. V. Zhukovsky, K. S. Sandomirski, and S. V. Gaponenko, *Phys. Rev. E* **65** (2002) 036621.
- [56] D. S. Díaz-Guerrero, L. M. Gaggero-Sager, I. Rodríguez-Vargas, and G. G. Naumis, *Fractals* **24** (2016) 1630002.
- [57] G. W. Semenoff, *Phys. Scr.* **T146** (2012) 014016.
- [58] D. S. Diaz-Guerrero, F. Montoya, L. M. Gaggero-Sager, and R. Perez-Alvarez, *Progress In Electromagnetics Research Letters* **2** (2008) 149.
- [59] A. De Martino, L. Dell'Anna, and R. Egger, *Phys. Rev. Lett.* **98** (2007) 066802.
- [60] Vitor M. Pereira and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. Lett.* **103** (2009) 046801.
- [61] S. Sengupta, A. Chakrabarti and S. Chattopadhyay, *Phys. Rev. B* **71** (2005) 134204.
- [62] S. Sengupta, A. Chakrabarti and S. Chattopadhyay, *Physica B* **344** (2004) 307.
- [63] B. Lindquist and R. Riklund, *Phys. Rev. B* **56** (1997) 13902.
- [64] A. De Martino, L. Dell'Anna, and R. Egger, *Solid State Commun.* **144** (2007) 547.
- [65] M. Ramezani Masir, P. Vasilopoulos, and F. M. Peeters, *New J. Phys.* **11** (2009) 095009.
- [66] M. Ramezani Masir, P. Vasilopoulos, and F. M. Peeters, *Appl. Phys. Lett.* **93** (2008) 242103.
- [67] M. Ramezani Masir, P. Vasilopoulos, A. Matulis, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **77** (2008) 235443.
- [68] S. Ghosh and M. Sharma, *J. Phys. Condens. Matter* **21** (2009) 292204.
- [69] L. Dell'Anna and A. De Martino, *Phys. Rev. B* **79** (2009) 045420.

- 
- [70] L. Dell'Anna and A. De Martino, *Phys. Rev. B* **83** (2011) 155449.
- [71] L. Z. Tan, C. -H. Park, and S. G. Louie, *Phys. Rev. B* **81** (2010) 195426.
- [72] H. Xu, T. Heinzl, M. Ewaldsson, S. Ihnatsenka, and I. V. Zozoulenko, *Phys. Rev. B* **75** (2007) 205301.
- [73] S. Park and H. S. Sim, *Phys. Rev. B* **77** (2008) 075433.
- [74] A. Kormanyos, P. Rakyta, L. Oroszlany, and J. Cserti, *Phys. Rev. B* **78** (2008) 045430.
- [75] L. Oroszlany, P. Rakyta, A. Kormanyos, C. J. Lambert, and J. Cserti, *Phys. Rev. B* **77** (2008) 081403(R).
- [76] T. K. Ghosh, A. De Martino, W. Häusler, L. Dell'Anna, and R. Egger, *Phys. Rev. B* **77** (2008) 081404(R).
- [77] M. Ramezani Masir, P. Vasilopoulos, and F. M. Peeters, *J. Phys.: Condens. Matter* **23** (2011) 315301.
- [78] Y. P. Bliokh, V. Freilikher, and F. Nori, *Phys. Rev. B* **81** (2010) 075410.
- [79] D. Wang and G. Jin, *Europhys. Lett.* **88** (2009) 17011.
- [80] W. Häusler, A. De Martino, T. K. Ghosh, and R. Egger, *Phys. Rev. B* **78** (2008) 165402.
- [81] N. Myoung and G. Ihm, *Physica E* **42** (2009) 70.
- [82] N. Myoung, G. Ihm, and S.J. Lee, *Phys. Rev. B* **83** (2011) 113407.
- [83] W. Huang, Y. He, Y. Yang, and C. Li, *J. Appl. Phys.* **111** (2012) 053712.
- [84] F. Zhai and K. Chang, *Phys. Rev. B* **77** (2008) 113409.

- 
- [85] B. Soodchomshom, I. M. Tang, and R. Hoonsawat, *Physica E* **41** (2009) 1310.
- [86] F. Zhai, X. Zhao, K. Chang, and H. Q. Xu, *Phys. Rev. B* **82** (2010) 115442.
- [87] M. Tahir and K. Sabeeh, *Phys. Rev. B* **77** (2008) 195421.
- [88] R. Nasir, K. Sabeeh, and M. Tahir, *Phys. Rev. B* **81** (2010) 085402.
- [89] H. Xu, T. Heinzl, M. Evaldsson, and I. V. Zozoulenko, *Phys. Rev. B* **77** (2008) 245401.
- [90] A. V. Shytov, M. S. Rudner, and L. S. Levitov, *Phys. Rev. Lett.* **101** (2008) 156804.
- [91] M. Ramezani Masir, P. Vasilopoulos, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **82** (2010) 115417.
- [92] M. Sharma and S. Ghosh, *J. Phys.: Condens. Matter* **23** (2011) 055501.
- [93] Y. Wang, Y. Liu, and B. Wang, *Superlattice Microstruct.* **60** (2013) 240.
- [94] Y. Li, Q. Wan, and M. B. A. Jalil, *Phys. D: Appl. Phys.* **48** (2015) 465304.
- [95] W. -T. Lu, S. -J. Wang, Y. -L. Wang, H. Jiang, and W. Li, *Phys. Lett. A* **377** (2013) 1368.
- [96] H. Liu, H. Zhang, and D. Liu, *Phys. Lett. A* **379** (2015) 192.
- [97] L. Sun, C. Fang, and Y. Guo, *J. Appl. Phys.* **108** (2010) 063715.
- [98] B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature*, Freeman, San Francisco, CA, 1982.
- [99] T. Ficker and P. Benesovsky, *Eur. J. Phys.* **23** (2002) 403.
- [100] J. S. Ardenghi, P. Bechthold, P. Jasen, E. Gonzalez, and A. Juan, *Superlattice Microstruct.* **89** (2016) 398.

- 
- [101] Y. Xu, Y. He, Y. Yang, and H. Zhang, *Superlattice Microstruct.* **80** (2015) 63.
- [102] R. Rodríguez-González, I. Rodríguez-Vargas, D. S. Díaz-Guerrero, and L. M. Gaggero-Sager, *Eur. Phys. J. B* **89** (2016) 17.
- [103] R. Rodríguez-González and I. Rodríguez-Vargas, *Physica E* **69** (2015) 177.
- [104] J. E. Moore and L. Balents, *Phys. Rev. B* **75** (2007) 121306.
- [105] Liang Fu. and C. L. Kane, *Phys. Rev. B* **76** (2007) 045302.
- [106] M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82** (2010) 3045.
- [107] S. M. Young, S. Zaheer, J. C. Teo, C. L. Kane, E. J. Mele, and A. M. Rappe, *Phys. Rev. Lett.* **108** (2012) 140405.
- [108] Z. K. Liu et al., *Science* **343** (2014) 864.
- [109] Xiangang Wan, Ari M. Turner, Ashvin Vishwanath, and Sergey Y. Savrasov, *Phys. Rev. B* **83** (2011) 205101.
- [110] A. A. Burkov and Leon Balents, *Phys. Rev. Lett.* **107** (2011) 127205.
- [111] M. Orlita et al., *Nat. Phys.* **10** (2014) 233.
- [112] A. Akrap et al., *Phys. Rev. Lett.* **117** (2016) 136401.
- [113] Semenoff G. W., *Phys. Scr.* **T186** (2012) 014016.
- [114] L. M. Gaggero-Sager, E. R. Pujals, and O. Sotolongo-Costa, *Phys. Stat. Sol. (b)* **220** (2000) 167.
- [115] L. M. Gaggero-Sager, E. Pujals, D. S. Díaz-Guerrero, and J. Escorcia-García, *Self-Similarity in Semiconductors: Electronic and Optical Properties, Optoelectronics - Materials and Techniques* (Prof. P. Predeep, InTech, 2011)

- 
- [116] J. Milton Pereira Jr., P. Vasilopoulos, and F. M. Peteers, *Appl. Phys. Lett.* **90** (2007) 132122.
- [117] X. Chen and J. -W. Tao, *Appl. Phys. Lett.* **94** (2009) 262102.
- [118] J. M. Pereira Jr., F. M. Peteers, A. Chaves, and G. A. Farias, *Semicond. Sci. Technol.* **25** (2010) 033002.
- [119] R. Biswas, S. Mukhopadhyay, and C. Sinha, *Physica E* **42** (2010) 1781.
- [120] S. Y. Zhou, G. -H. Gweon, A. V. Fedorov, P. N. First, W. A. de Heer, D. -H. Lee, F. Guinea, A. H. Castro Neto, and A. Lanzara, *Nat. Mater.* **6** (2007) 770.
- [121] G. Giovannetti, P. A. Khomyakov, G. Brocks, P. J. Kelly, and J. van den Brink, *Phys. Rev. B* **76** (2007) 073103.
- [122] X. Peng and R. Ahuja, *Nano Lett.* **8** (2008) 4464.
- [123] C. R. Dean, A. F. Young, I. Meric, C. Lee, L. Wang, S. Sorgenfrei, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Kim, K. L. Shepard, and J. Hone, *Nat. Nanotechnol.* **5** (2010) 722.
- [124] G. Gui, J. Li, and J. Zhong, *Phys. Rev. B* **78** (2008) 075435.
- [125] F. Guinea, M. I. Katsnelson, and A. K. Geim, *Nat. Phys.* **6** (2010) 30.
- [126] F. M. D. Pellegrino, G. G. N. Angilella, and R. Pucci, *Phys. Rev. B* **84** (2011) 195404.
- [127] D. S. Díaz-Guerrero, L. M. Gaggero-Sager, I. Rodríguez-Vargas, and O. Sotolongo-Costa, *Europhys. Lett.* **111** (2015) 57006.
- [128] H. García-Cervantes, L. M. Gaggero-Sager, D. S. Díaz-Guerrero, O. Sotolongo-Costa, and I. Rodríguez-Vargas, *Sci. Rep.* **7** (2017) 617.

- [129] E. van Veen, S. Yuan, M. I. Katsnelson, M. Polini, and A. Tomadin, *Phys. Rev. B* **93** (2016) 115428.

---

## Publicaciones

---

A continuación se presenta una lista donde se muestran los artículos que surgieron del trabajo de la presente tesis.

1. **Self-similar transmission patterns induced by magnetic field effects in graphene**, R. Rodríguez-González, I. Rodríguez-Vargas, D. S. Díaz-Guerrero and L. M. Gaggero-Sager, *Physica E* **101**, 22 (2018).
2. **Transmission and transport properties in Cantor graphene structures: The case of magnetoelectric modulation**, R. Rodríguez-González and I. Rodríguez-Vargas, *Physica B* **150**, 109 (2017).
3. **Self-similar transmission properties of aperiodic Cantor potentials in gapped graphene**, R. Rodríguez-González, I. Rodríguez-Vargas, D. S. Díaz-Guerrero and L. M. Gaggero-Sager, *The European Physical Journal B* **89**, 17 (2016).
4. **The role of fractal aperiodic order in the transmittance, conductance and electronic structure of graphene-based systems**, R. Rodríguez-González and I. Rodríguez-Vargas, *Physica E* **69**, 177 (2015).