



**Departamento de
Física Teórica
Universidad Zaragoza**

TRABAJO FIN DE GRADO

**Efectos de interferencia cuántica en
nanocintas de grafeno con imperfecciones:
fluctuaciones aleatorias del voltaje**

Grado en Física

Realizado por
Pablo Encarnación Villarroya

Dirigido por
Víctor Arturo Gopar Sánchez

Curso 2022/2023

Contenidos

1	Introducción	2
2	Marco teórico	3
2.1	Transporte cuántico: Formalismo de Landauer	3
2.2	Dispositivos multiterminales: Formalismo de Büttiker	5
2.3	Matriz de <i>scattering</i>	6
2.4	Transporte en presencia de desorden	7
3	Modelo numérico	9
3.1	Modelo <i>tight-binding</i>	9
3.2	Matriz de <i>scattering</i> : Kwant	11
4	Tratamiento teórico del problema multiterminal	12
5	Propiedades electrónicas del grafeno	16
5.1	Estructura de bandas del grafeno	17
5.2	Nanocintas de grafeno	17
5.3	Localización	19
6	Resultados	20
6.1	Energía fuera del centro de la banda	20
6.2	Energía en el centro de la banda	22
7	Conclusiones	23
	Referencias	25

1 Introducción

Los fenómenos de transporte electrónico a nivel macroscópico son conocidos. Las propiedades conductoras de una muestra vienen caracterizadas por la caída de potencial V a lo largo de esta cuando circula una corriente I . Si tomamos un conductor de longitud L y sección trasversal W , el voltaje está dado por la ley de Ohm,

$$V = IR \quad R = \frac{L}{\sigma W} \quad (1.1)$$

donde σ es la conductividad del conductor.

Sin embargo, la descripción de Ohm de los conductores no es válida en sistemas pequeños ($\sim \mu m$) donde los efectos cuánticos del transporte cobran relevancia. Esta escala, llamada mesoscópica, corresponde con tamaños menores que la longitud de coherencia de los electrones (*mean free path* inelástico), que es el rango de distancias que pueden recorrer de forma coherente. Es por esto que a escala mesoscópica la descripción del transporte electrónico es imprescindible tener en cuenta su comportamiento ondulatorio y, en consecuencia, los efectos de interferencia cuántica.

En régimen macroscópico, la ley de Ohm establece que el voltaje depende linealmente de L . Como veremos en este trabajo, a escalas mesoscópicas esto deja de ser cierto y el voltaje puede oscilar como una función de L debido a las interferencias constructivas y destructivas de los electrones.

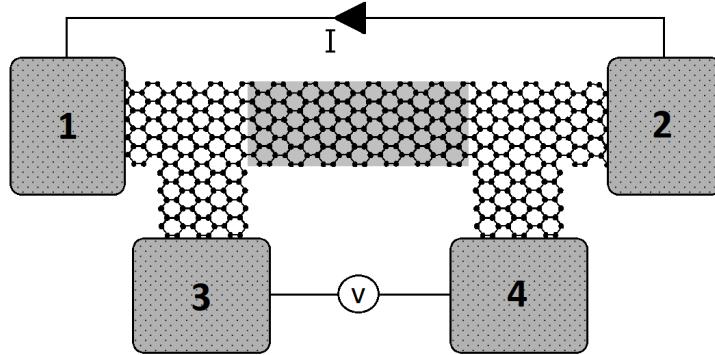


Figura 1: Esquema del montaje con cuatro terminales que se aborda en este trabajo. La zona central sombreada es una muestra de grafeno con imperfecciones, mientras que las zonas sin sombrear no presentan imperfecciones y conectan la muestra con los cuatro terminales.

Habitualmente, tanto en sistemas macroscópicos como mesoscópicos, las medidas de caída de potencial en una muestra conductora se realizan por medio de montajes multiterminales, donde se inyecta una corriente entre dos terminales y se emplean el resto como sondas de voltaje. Es por ello de interés estudiar el comportamiento del voltaje medido en un montaje de este tipo bajo los efectos de interferencia cuántica.

En este trabajo se va a estudiar el sistema de la figura (1), donde una nanocinta de grafeno se coloca entre cuatro terminales. Una corriente I circula entre los terminales 1 y 2, mientras que el voltaje se mide entre los terminales 3 y 4. Desde su descubrimiento en 2004, el grafeno ha sido un material de gran interés debido a sus propiedades únicas de transporte. Sin embargo, a pesar de los avances en la fabricación de nanoestructuras, el grafeno no tiene una estructura perfecta, ya sea por la existencia de impurezas o defectos en la propia red, o por el efecto que el sustrato sobre el que se colocan la muestra tiene sobre la red. Estas imperfecciones las modelaremos en forma de un desorden aleatorio en la red, lo cual tiene un fuerte efecto sobre el transporte de electrones a escalas mesoscópicas y nanoscópicas.

Para abordar el problema teóricamente se emplea el formalismo de Landauer para describir el transporte cuántico a escala mesoscópica, así como la teoría de matrices aleatorias para abordar estadísticamente las imperfecciones de la muestra de grafeno. Así mismo, se obtienen resultados numéricos por medio del software *Kwant* y se contrastarán con la teoría.

2 Marco teórico

2.1 Transporte cuántico: Formalismo de Landauer

Antes de estudiar un sistema multiterminal damos una breve introducción al problema de transporte electrónico en un sistema de dos terminales. Para ello, vamos a emplear el llamado formalismo de *scattering* o formalismo de Landauer [1]. Este marco basa el transporte de electrones a lo largo de un conductor según la probabilidad de que se transmitan a través del mismo.

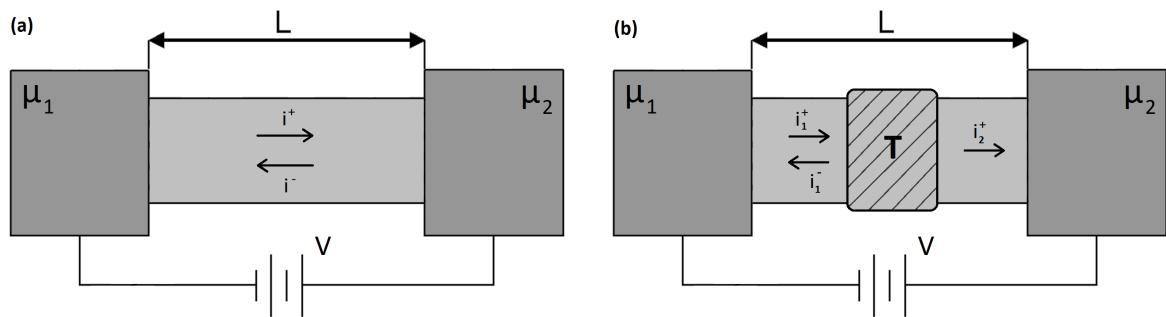


Figura 2: (a) Conductor balístico conectado a dos terminales con potenciales μ_1 y μ_2 . (b) Conductor con coeficiente de transmisión T conectado a dos terminales de potenciales μ_1 y μ_2 .

En lo que sigue vamos a tratar con un conductor de longitud L colocado entre dos terminales de potenciales electroquímicos μ_1 y μ_2 (figura 2),¹ de tal forma que los estados electrónicos

¹La razón por la que se usa el potencial electroquímico μ y no el electrostático V es porque la conducción puede darse tanto por un campo eléctrico (deriva) como por un gradiente de concentración de electrones (difusión). Así, este potencial engloba ambos procesos y la corriente es $J \propto d\mu/dx$.

pueden expresarse como $\psi(x, y) = \varphi(x)\phi(y)$. La parte transversal, $\phi(y)$, está completamente determinada por la geometría del conductor y define una estructura de bandas con energías $E_n(k)$. A una cierta energía E se define el número de canales de transmisión disponibles, $N(E)$, como el número de bandas que 'atraviesan' dicha energía, es decir,

$$N(E) = \sum_n \theta(E - E_n(k=0)) \quad (2.1)$$

Tomemos primero el caso de un conductor balístico (figura 2a), es decir, un conductor de longitud menor que el recorrido libre medio (*mean free path*) de los electrones, de tal forma que no ocurren procesos de *scattering*. La corriente puede expresarse como el número de electrones multiplicado por el tiempo que pasan en el conductor, esto es,

$$\begin{aligned} i^+ &= e \sum_k N_1(E) f_1(E) \frac{v_g}{L} = \frac{e}{L} \sum_k N_1(E) f_1(E) \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} \\ &= \frac{e}{L} \frac{1}{\hbar} 2 \frac{L}{2\pi} \int N_1(E) f_1(E) \frac{\partial E}{\partial k} dk = \frac{2e}{h} \int f_1(E) N_1(E) dE \end{aligned} \quad (2.2)$$

donde f_1 es la distribución de Fermi del contacto de la izquierda. Análogamente podemos escribir

$$i^- = \frac{2e}{h} \int f_2(E) N_2(E) dE \quad (2.3)$$

Así, la corriente total es, suponiendo $N_1 = N_2$ (lo cual es cierto en ausencia de *scattering* inelástico),

$$\begin{aligned} I &= i^+ - i^- = \frac{2e}{h} \int N(E) (f_1(E) - f_2(E)) dE \simeq \frac{2e}{h} \int N(E) \left(\frac{\partial f}{\partial \mu} \right)_{eq} (\mu_1 - \mu_2) dE \\ &= \frac{2e^2}{h} N(E_f) \frac{\mu_1 - \mu_2}{e} \end{aligned} \quad (2.4)$$

donde hemos asumido bajas temperaturas y una diferencia de potencial pequeña, y donde $N(E_f)$ es el número de canales en el nivel de Fermi. De esta forma, vemos que la conductancia, definida como $G = I/V$, queda cuantizada en múltiplos enteros de $G_0 = 2e^2/h$. En la figura (3) se muestra la evolución de la conductancia con la energía para un conductor con una red cristalina cuadrada.

Landauer generaliza el desarrollo anterior al caso más realista de un conductor donde el *scattering* elástico de electrones, debido a imperfecciones en la red cristalina, es relevante (figura 2b). En este caso, los procesos de *scattering* elástico se recogen en el coeficiente de transmisión T de un electrón proveniente del terminal 1 que se transmite al terminal 2. Así, podemos escribir las corrientes entrantes y salientes como

$$i_1^+ = \frac{2e^2}{h} N \frac{\mu_1 - \mu_2}{e} \quad i_2^+ = \frac{2e^2}{h} NT \frac{\mu_1 - \mu_2}{e} \quad i_1^- = \frac{2e^2}{h} N(1-T) \frac{\mu_1 - \mu_2}{e} \quad (2.5)$$

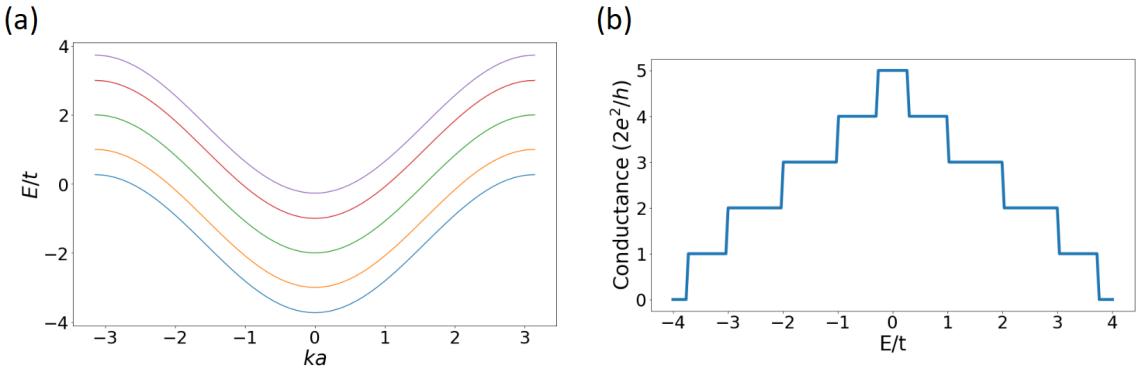


Figura 3: (a) Estructura de bandas de una red cuadrada. (b) Dependencia de la conductancia (en unidades de G_0) con la energía (en unidades del parámetro de *tight-binding* t) a temperatura $T = 0$ K. Notar cómo la conductancia varía en múltiplos enteros del cuadro G_0 conforme varía la energía y se van abriendo o cerrando canales.

La corriente total y la conductancia en este caso son

$$I = i_1^+ - i_1^- = \frac{2e^2}{h} NT \frac{\mu_1 - \mu_2}{e} \quad G = \frac{2e^2}{h} NT = G_0 \bar{T} \quad (2.6)$$

donde $\bar{T} = NT$. Esta expresión es la fórmula de Landauer y la base del formalismo de *scattering* para el transporte cuántico. Además, para $T = 1$ recuperamos la expresión (2.4) del caso balístico.

2.2 Dispositivos multiterminales: Formalismo de Büttiker

En medidas experimentales es habitual usar sistemas multiterminales para medir voltajes, de forma que la corriente se inyecta y recoge por dos de ellos y los demás miden el voltaje a corriente nula. Un ejemplo de ello se muestra en la figura (1). Mientras que en sistemas macroscópicos se supone que los terminales empleados para medir el voltaje solamente 'sienten' el potencial local sin interferir en el sistema, en un sistema mesoscópico no puede suponerse esto, pues la existencia de estos terminales ofrecen a los electrones nuevos caminos de *scattering*. Büttiker [2] soluciona este problema generalizando la fórmula de Landauer y tratando sin distinción los terminales. Así, la corriente I_p por el terminal p puede escribirse en términos del potencial de los demás terminales como

$$I_p = \frac{2e^2}{h} \sum_q \left[\bar{T}_{qp} \frac{\mu_p}{e} - \bar{T}_{pq} \frac{\mu_q}{e} \right] \quad (2.7)$$

donde \bar{T}_{pq} es el coeficiente de transmisión desde el terminal q al terminal p . Para asegurar que las corrientes se anulan cuando todos los potenciales son iguales, debe cumplirse

$$\sum_q \bar{T}_{qp} = \sum_q \bar{T}_{pq} \quad (2.8)$$

luego la ecuación de Büttiker queda

$$I_p = \frac{2e^2}{h} \sum_q \bar{T}_{pq}(\mu_p - \mu_q)/e \quad (2.9)$$

o, equivalentemente,

$$I_p = \frac{2e^2}{h} \left[\bar{T}_{pp}\mu_p - \sum_{q \neq p} \bar{T}_{pq}\mu_q \right] \quad (2.10)$$

2.3 Matriz de *scattering*

La conductancia de una muestra, de acuerdo con el formalismo anterior, depende del coeficiente de transmisión T a través del mismo, tanto en el caso de dos terminales como en el caso multi-terminal. Esta función puede obtenerse a través de la matriz de *scattering* S , que relaciona las amplitudes de las ondas entrantes y salientes del conductor. En general podemos escribir estas funciones de onda (estados de *scattering*) en el p -ésimo terminal como

$$\psi_p = \sum_E \psi_{pE} = \sum_E \left[a_{pE} \phi_{pE}(y) e^{ik_E^+ x_p} + b_{pE} \phi_{pE}(y) e^{ik_E^- x_p} \right] \quad (2.11)$$

La matriz de *scattering* relaciona las amplitudes salientes con las entrantes: $\{b\} = [S]\{a\}$. Si cada conexión del conductor con los terminales tiene N_p modos de propagación abiertos, entonces la matriz de *scattering* tiene dimensiones $N_T \times N_T$, con $N_T = \sum_p N_p$.

Así, si el conductor está conectado a los distintos terminales por N_T modos de propagación con amplitudes $(a_1, b_1), (a_2, b_2), \dots, (a_{N_T}, b_{N_T})$, entonces la matriz de *scattering* tiene la forma

$$\begin{Bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{N_T} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \dots & s_{1N_T} \\ s_{21} & s_{22} & \dots & s_{2N_T} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{N_T 1} & s_{N_T 2} & \dots & s_{N_T N_T} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_{N_T} \end{Bmatrix} \quad (2.12)$$

De esta forma, conocida la matriz de *scattering* para un conductor dado², el coeficiente de transmisión entre el canal n y el canal m está dado por

$$T_{mn} = |s_{mn}|^2 \quad (2.13)$$

²Existen diferentes algoritmos para computarla. En este trabajo se emplea el algoritmo de *Kwant* (WFM, *Wave function matching*), descrito en la sección (3.2).

y, por tanto, el coeficiente de transmisión del terminal q al terminal p viene dado por

$$\bar{T}_{pq} = \sum_{n \in q} \sum_{m \in p} |s_{mn}|^2 \quad (2.14)$$

Mencionar también que una propiedad importante de la matriz de *scattering* es que, para asegurar la conservación de la corriente, debe ser unitaria. Es decir,

$$S^\dagger S = \mathbb{I} = SS^\dagger \quad (2.15)$$

2.4 Transporte en presencia de desorden

Como se ha mencionado, el objeto de estudio es el transporte electrónico a través de un sistema desordenado, es decir, un sistema con imperfecciones distribuidas a lo largo de su red de forma aleatoria. La presencia de fuentes de desorden da un carácter aleatorio al transporte y, por tanto, se hace necesario un análisis estadístico del mismo. En la figura (2.4a) se muestra la conductancia como función de la energía para un sistema desordenado, observándose fuertes fluctuaciones de G . Por ello recurrimos a la teoría de matrices aleatorias para modelar este desorden.

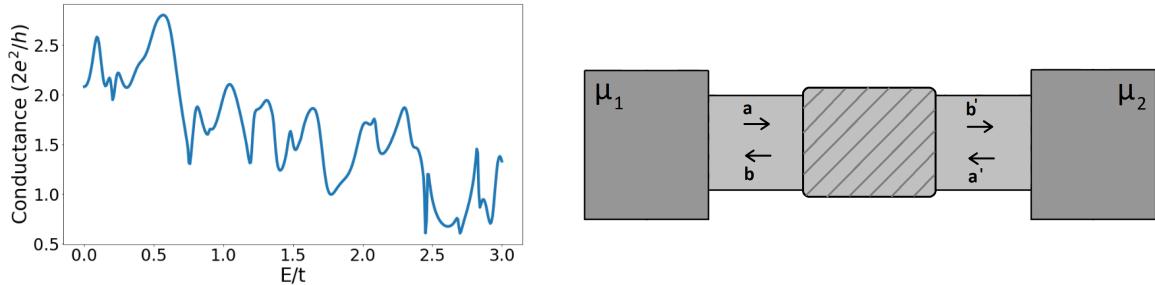


Figura 4: (a) Conductancia en función de la energía en un sistema desordenado, presentando fuertes fluctuaciones. (b) Esquema de las amplitudes de onda entrantes y salientes, relacionadas por las matrices de *scattering* y transferencia.

En este contexto es habitual emplear la matriz de transferencia M en lugar de la matriz S . Mientras que la matriz de *scattering* relaciona amplitudes de onda entrantes y salientes del sistema, la matriz de transferencia relaciona la función de onda en un extremo del conductor con la función de onda en el otro extremo. Por ejemplo, para el sistema de la figura (2.4b),

$$\begin{Bmatrix} b \\ b' \end{Bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} r & t' \\ t & r' \end{bmatrix}}_S \begin{Bmatrix} a \\ a' \end{Bmatrix} \quad \begin{Bmatrix} a' \\ b' \end{Bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \beta^* & \alpha^* \end{bmatrix}}_M \begin{Bmatrix} a \\ b \end{Bmatrix} \quad (2.16)$$

$$\text{donde } \alpha = 1/t^* ; \quad \beta = r'/t' ; \quad \beta^* = -r/t' ; \quad \alpha^* = 1/t'$$

donde en este caso r y r' son las amplitudes de reflexión y t y t' las de transmisión.

La utilidad de esta matriz reside principalmente en su propiedad multiplicativa: si en un conductor existen dos centros de *scattering* con matrices de transferencia M_2 y M_1 , entonces la matriz de transferencia del sistema conjunto es $M = M_1 M_2$. Además, la conservación del flujo (2.15) se traduce para la matriz de transferencia en la condición $\det(M) = 1$. Es común expresar esta matriz en forma polar, quedando definida por parámetros independientes (λ, θ, μ) ,

$$M = \begin{bmatrix} e^{i\mu} & 0 \\ 0 & e^{-i\mu} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{1+\lambda}e^{i\theta} & \sqrt{\lambda}e^{-i\theta} \\ \sqrt{\lambda}e^{i\theta} & \sqrt{1+\lambda}e^{-i\lambda} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-i\mu} & 0 \\ 0 & e^{-i\mu} \end{bmatrix} \quad (2.17)$$

de forma que el coeficiente de transmisión (y, por tanto, la conductancia) se relaciona con λ como

$$T = \frac{1}{1+\lambda} \quad (2.18)$$

El objetivo del uso de la teoría de matrices aleatorias es hallar una distribución de probabilidad para la conductancia o, equivalentemente, para λ , pues por la relación anterior se puede obtener una a partir de la otra. Uno de los resultados de la teoría es la llamada ecuación de Mel'nikov (Anexo C), una ecuación diferencial para describir la evolución de la densidad de probabilidad $p(\lambda)$, conforme varía la longitud del sistema. Dado un sistema unidimensional de longitud L , la ecuación de Mel'nikov es [4]

$$\frac{\partial p_s(\lambda)}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[\lambda(1+\lambda) \frac{\partial p_s(\lambda)}{\partial \lambda} \right] \quad (2.19)$$

donde se define el parámetro adimensional $s = L/l$, siendo l el *mean free path* elástico.

La solución $p_s(\lambda)$ de esta ecuación nos proporciona la distribución de la conductancia G , la cual es proporcional a T , por medio de la relación (2.18), siendo esta [8]

$$P_s(G) = C \frac{[\operatorname{acosh}(1/\sqrt{G})]^{1/2}}{G^{3/2}(1-G)^{1/4}} e^{-(1/s)\operatorname{acosh}^2(1/\sqrt{G})} \quad (2.20)$$

donde $s = L/l$ y C es una constante de normalización. A partir de esta distribución pueden obtenerse los valores promedio de G y $\ln(G)$ sobre distintas realizaciones del desorden,

$$\langle G \rangle = e^{-L/l} \quad \langle -\ln(G) \rangle = L/l \quad (2.21)$$

Notemos que $\langle G \rangle$ decrece exponencialmente con L . Esto es una consecuencia de la llamada localización de Anderson, un efecto ampliamente estudiado por el cual las funciones de onda en un sistema unidimensional desordenado se localizan exponencialmente en el espacio.

Existen, además, sistemas en los que la localización de las funciones de onda causada por la existencia de desorden no es exponencial. A este efecto lo llamamos localización anómala. En este caso se encuentra que

$$\langle G \rangle \propto \frac{1}{L^\alpha} \quad \langle -\ln(G) \rangle \propto L^\alpha \quad \alpha < 1 \quad (2.22)$$

En particular esto ocurre típicamente para energías $E \approx 0$ en el centro de la banda [7].

Además de la distribución de G , otro resultado de la teoría de matrices aleatorias que vamos a emplear es el siguiente. Dada una matriz de transferencia con entradas aleatorias (ver ecuación (2.16)) y una función de ellas, $F(\alpha, \alpha^*, \beta, \beta^*)$, puede determinarse su valor esperado a partir de la ecuación [6]

$$\frac{\partial \langle F \rangle}{\partial s} = \langle HF \rangle_s \quad (2.23)$$

donde $s = L/l$ y H es el operador diferencial

$$H = (\alpha\alpha^* + \beta\beta^*) \left[\frac{\partial^2}{\partial\alpha\partial\alpha^*} \right] + 2\alpha\beta^* \frac{\partial^2}{\partial\alpha\partial\beta^*} + 2\alpha^*\beta \frac{\partial^2}{\partial\alpha^*\partial\beta} \\ - \frac{1}{2} \left[\alpha^2 \frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} + 2\alpha\beta \frac{\partial^2}{\partial\alpha\partial\beta} + \beta^2 \frac{\partial^2}{\partial\beta^2} \right] - \frac{1}{2} \left[\alpha^{*2} \frac{\partial^2}{\partial\alpha^{*2}} + 2\alpha^*\beta^* \frac{\partial^2}{\partial\alpha^*\partial\beta^*} + \beta^{*2} \frac{\partial^2}{\partial\beta^{*2}} \right] \quad (2.24)$$

y donde la ecuación debe resolverse con la condición inicial

$$\langle F(\alpha, \alpha^*, \beta, \beta^*) \rangle_{s=0} = F(1, 1, 0, 0) \quad (2.25)$$

es decir, con la condición de que para un sistema de tamaño nulo la matriz M es la identidad.

3 Modelo numérico

Para tratar numéricamente el problema de la figura (1) debemos, por un lado, modelar la propia red atómica del material para obtener su estructura de bandas y trabajar sobre ella. Por otro lado, debemos poder, dado el sistema y los terminales a los que está conectado, computar su matriz de *scattering* y conductancia.

3.1 Modelo *tight-binding*

El modelo *tight-binding* es un modelo empleado para describir los electrones de una red cristalina. Este método, como su nombre indica, se basa en suponer que las funciones de onda atómicas están fuertemente localizadas en cada átomo, de forma que el solapamiento entre funciones de onda de distintos átomos sea pequeño. En esta situación, la función de onda de un electrón en un punto de la red podrá expresarse como una combinación lineal de orbitales atómicos (LCAO,

Linear Combination of Atomic Orbitals):

$$|i\rangle = \sum_j a_{ij} |\phi_j\rangle \quad (3.1)$$

Usando la propiedad $\sum_i |i\rangle \langle i| = \mathbb{I}$, el hamiltoniano del sistema será

$$H = \sum_i \sum_j |i\rangle \langle i| H |j\rangle \langle j| = \sum_{i,j} H_{ij} |i\rangle \langle j| = \sum_i \epsilon_i |i\rangle \langle i| - \sum_{i,j(i \neq j)} t_{ij} |i\rangle \langle j| \quad (3.2)$$

donde ϵ_i son las energías '*onsite*', es decir, los elementos de matriz del hamiltoniano entre estados de un punto de la red, y $-t_{ij}$ (integral de transferencia) son las energías '*offsite*', es decir, los elementos de matriz entre puntos distintos de la red. La forma más simple de este hamiltoniano es suponer que solamente hay un acople entre primeros vecinos de la red: $t_{ij} = t$ si i y j son primeros vecinos, y 0 en caso contrario. Por simplicidad también supondremos que $\epsilon_i = 0$, pues solo contribuyen con un desplazamiento en energía de la estructura de bandas. Así, el hamiltoniano empleado es

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} |i\rangle \langle j| \quad (3.3)$$

donde $\langle i,j \rangle$ denota que la suma recorre los pares de índices de primeros vecinos.

En el problema que se trata en este trabajo el sistema tiene un número finito de átomos, pues tratamos con una nanocinta de grafeno colocada entre dos terminales. En tal caso, el hamiltoniano (3.3) puede escribirse en forma matricial numerando los átomos de la red y colocando la integral de transferencia en los elementos de matriz correspondientes a primeros vecinos, como por ejemplo para un sistema de cuatro átomos:

$$H = \begin{bmatrix} 0 & -t & -t & 0 \\ -t & 0 & 0 & -t \\ -t & 0 & 0 & -t \\ 0 & -t & -t & 0 \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

Así, conociendo t a través de medidas experimentales solo hay que diagonalizar el hamiltoniano para obtener la estructura de bandas.

Para realizar cálculos analíticos es más útil emplear la segunda cuantización. En segunda cuantización las funciones de onda pasan a emplearse como operadores, y, por tanto, los coeficientes a_i de (3.1) también. Estos operadores a_i y sus adjuntos a_i^\dagger se llaman operadores destrucción y creación, respectivamente. Además, se trabaja en el espacio de números de ocupación, donde los estados representan la cantidad de partículas presentes en cada estado. Por ejemplo, en un sistema de dos átomos, el estado $|1, 0\rangle$ simboliza un electrón en el primer átomo y ninguno en el segundo, mientras que $|1, 1\rangle$ simboliza un electrón en cada uno de los dos átomos.

Los operadores creación y destrucción actúan sobre este espacio creando y destruyendo partículas. Si $|0\rangle$ es el estado vacío (es decir, sin electrones en ningún átomo), entonces

$$\begin{aligned} a_1^\dagger |0\rangle &= |1,0\rangle & a_2^\dagger |0\rangle &= |0,1\rangle \\ a_1 |1,0\rangle &= |0\rangle & a_2 |0,1\rangle &= |0\rangle \\ a_1 |0\rangle &= 0 & a_2 |0\rangle &= 0 \end{aligned} \quad (3.5)$$

De esta forma, si los estados de (3.1) los interpretamos como $|i\rangle = a_i^\dagger |0\rangle$, el hamiltoniano (3.3) se convierte en

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^\dagger a_j \quad (3.6)$$

En el caso de redes bipartitas, como el grafeno, la red se puede separar en dos subredes de tal forma que todos los vecinos de un átomo de una red pertenecen a la otra red. Por tanto, si a_i son operadores creación/destrucción sobre una red y b_i lo son sobre la otra red,

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i) \quad (3.7)$$

3.2 Matriz de *scattering*: Kwant

Para los cálculos numéricos en este trabajo se ha empleado el software *Kwant* [13], cuya principal función es obtener la función de onda y matriz de *scattering* de un sistema dado.

Para ello, se describe el sistema de estudio y sus conexiones mediante un modelo *tight-binding* con el fin de resolver el problema de autovalores

$$\begin{bmatrix} H_S & V_{LS}^\dagger & 0 & 0 & 0 \\ V_{LS} & H_L & V_L^\dagger & 0 & 0 \\ 0 & V_L & H_L & V_L^\dagger & 0 \\ 0 & 0 & V_L & H_L & V_L^\dagger \\ 0 & 0 & 0 & V_L & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_n(S) \\ \phi_n(1) \\ \phi_n(2) \\ \phi_n(3) \\ \vdots \end{bmatrix} = E_n \begin{bmatrix} \psi_n(S) \\ \phi_n(1) \\ \phi_n(2) \\ \phi_n(3) \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (3.8)$$

donde se tratan todos los contactos como un único contacto efectivo desconexo, dividido en múltiples secciones, cada una de ellas más alejada del sistema central que la anterior.

Así, el hamiltoniano total del sistema tiene una forma tridiagonal³ donde H_L es el hamiltoniano de cada una de estas secciones, el sistema central está acoplado a la primera sección por la matriz V_{LS} y cada sección está acoplada a la siguiente por la matriz V_L . Además, H_S es el

³Esto es muy conveniente, pues existen algoritmos optimizados para diagonalizar matrices con muchos elementos nulos.

hamiltoniano del sistema central, con la forma matricial de (3.3), $\psi_n(S)$ es la función de onda en el sistema central y $\phi_n(i)$ son las funciones de onda en la i -ésima sección del contacto.

Dada la simetría translacional de los contactos, podemos emplear el teorema de Bloch para escribir los autoestados del operador translación como

$$\xi_n(p) = \chi_n e^{-ik_n p a} \quad \text{donde} \quad (H_L + V_L e^{ik_n a} + V_L^\dagger e^{-ik_n a}) \chi_n = \epsilon_n \chi_n \quad (3.9)$$

donde a es el parámetro de red de dicha simetría translacional. Estos autoestados los clasificamos en modos evanescentes ($\xi_n^{(ev)}(p)$, $k_n \in \mathbb{C}$) y propagantes ($k_n \in \mathbb{R}$). Además, los propagantes los clasificamos en entrantes ($\xi_n^{(in)}(p)$, $k_n < 0$) y salientes ($\xi_n^{(out)}(p)$, $k_n > 0$), que por definición quedan relacionados por la matriz de *scattering*

$$\xi_n^{(out)}(p) = \sum_m S_{mn} \xi_m^{(in)}(p) \quad (3.10)$$

De esta forma, podemos expresar las funciones de onda en (3.8) como

$$\phi_n(i) = \xi_n^{(in)}(i) + \sum_m S_{mn} \xi_m^{(in)}(i) + \sum_m \tilde{S}_{mn} \xi_m^{(ev)}(p) \quad (3.11)$$

donde \tilde{S} es una matriz de *scattering* generalizada para modos de energía cerrados (ondas evanescentes). El algoritmo de *Kwant*, tras diagonalizar (3.8), tiene como principal resultado la matriz S_{mn} y las funciones de onda en el sistema central, $\psi_n(S)$. Así, el coeficiente de transmisión entre los contactos i y j puede obtenerse como

$$T_{ij} = \sum_{m \in i, n \in j} |S_{mn}|^2 \quad (3.12)$$

donde la suma recorre los canales de energía disponibles en cada contacto.

4 Tratamiento teórico del problema multiterminal

Recordemos que el objetivo es estudiar un montaje típico de medidas de voltaje con cuatro puntas de prueba en nanocintas de grafeno (figura (1)). Para ello vamos a describir, basándonos en el formalismo de Landauer-Büttiker, un sistema unidimensional esquematizado en la figura (5). En el tratamiento de este problema es fundamental obtener la matriz de *scattering* del sistema completo.

Partiendo de la ecuación de Büttiker (2.10) e imponiendo que la corriente por los terminales 3 y 4, al ser sondas de voltaje, se anule, tenemos que la corriente en cada terminal se escribe como

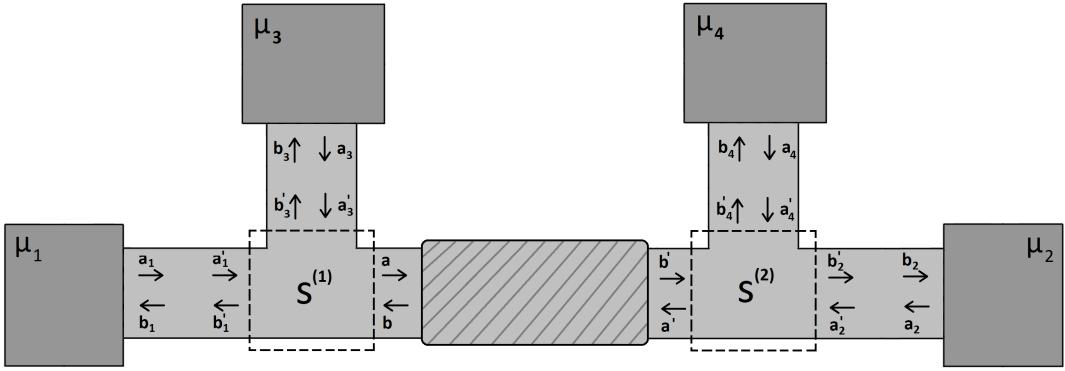


Figura 5: Sistema de estudio: un conductor con imperfecciones conectado a cuatro terminales. Se inyecta una corriente por el terminal 1 que se recoge por el 2, mientras que los terminales 3 y 4 se emplean para medir el voltaje o, equivalentemente, la resistencia de la muestra.

$$\begin{aligned}
 I_1 &= \frac{2e^2}{h} [T_{11}\mu_1 - T_{12}\mu_2 - T_{13}\mu_3 - T_{14}\mu_4] \\
 I_2 &= \frac{2e^2}{h} [T_{22}\mu_2 - T_{21}\mu_1 - T_{23}\mu_3 - T_{24}\mu_4] \\
 I_1 &= I_2 \\
 I_3 &= \frac{2e^2}{h} [T_{33}\mu_3 - T_{31}\mu_1 - T_{32}\mu_2 - T_{34}\mu_4] = 0 \\
 I_4 &= \frac{2e^2}{h} [T_{44}\mu_4 - T_{41}\mu_1 - T_{42}\mu_2 - T_{43}\mu_3] = 0
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Manipulando este sistema algebraicamente, puede demostrarse (sección 3.4.3.3 de [3]) que la relación de voltajes en este sistema viene dada por

$$v = \frac{\mu_3 - \mu_4}{\mu_2 - \mu_1} = \frac{T_{13}T_{24} - T_{23}T_{14}}{(T_{13} + T_{23} + T_{43})(T_{14} + T_{24} + T_{34}) - T_{43}T_{34}} \tag{4.2}$$

Dado que nos interesa conocer las propiedades de transporte de la muestra conductora (una nanocinta de grafeno), vamos a considerar que solamente la muestra está desordenada y que los contactos son perfectos. Así, la matriz de *scattering* que nos interesa es la que relaciona las amplitudes primadas, $\{b'\} = [S'][a']$, de dimensión 4x4. Asimismo [11], definimos matrices de *scattering* para ambos puntos de contacto $S^{(1)}$ y $S^{(2)}$ y para el sistema central $\tilde{S}^{(12)}$

$$\begin{aligned}
 \begin{Bmatrix} b'_1 \\ a \\ b'_3 \end{Bmatrix} &= S^{(1)} \begin{Bmatrix} a'_1 \\ b \\ a'_3 \end{Bmatrix} & \begin{Bmatrix} b'_2 \\ a' \\ b'_4 \end{Bmatrix} &= S^{(2)} \begin{Bmatrix} a'_2 \\ b' \\ a'_4 \end{Bmatrix} & \begin{Bmatrix} b \\ b' \end{Bmatrix} &= \tilde{S}^{(12)} \begin{Bmatrix} a \\ a' \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{r} & \tilde{t} \\ \tilde{t} & \tilde{r}' \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a \\ a' \end{Bmatrix}
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

donde hay que destacar que la matriz $\tilde{S}^{(12)}$ está tomada respecto de dos puntos de referencia en los extremos del sistema central, y no respecto de un solo origen como es habitual.

Puede comprobarse (Anexo D) que los elementos de la matriz S' relevantes para la expresión (4.2) expresados en términos de la matriz de *scattering* del sistema central y las matrices de *scattering* de los puntos de contacto tienen la forma

$$\begin{aligned} S'_{13} &= S_{13}^{(1)} + \frac{1}{\Delta} S_{12}^{(1)} (\tilde{r}'^* - S_{22}^{(2)}) S_{23}^{(1)}, \\ S'_{24} &= S_{13}^{(2)} + \frac{1}{\Delta} S_{12}^{(2)} (\tilde{r}^* - S_{22}^{(1)}) S_{23}^{(2)}, \\ S'_{14} &= -\frac{1}{\Delta} S_{12}^{(1)} \tilde{t}^* S_{23}^{(2)}, \\ S'_{23} &= -\frac{1}{\Delta} S_{12}^{(2)} \tilde{t}^* S_{23}^{(1)}, \\ S'_{34} &= -\frac{1}{\Delta} S_{32}^{(1)} \tilde{t}^* S_{23}^{(2)} \end{aligned} \quad (4.4)$$

donde $\Delta = (\tilde{r}^* - S_{22}^{(1)}) (\tilde{r}'^* - S_{22}^{(2)}) - (\tilde{t}^*)^2$.

Por un lado, calcularemos la matriz $\tilde{S}^{(12)}$ del sistema central numéricamente empleando el software *Kwant*, y por otro lado modelaremos las matrices $S^{(1)}$ y $S^{(2)}$ como [12]

$$S^{(1)} = S^{(2)} = \begin{bmatrix} a & b & \sqrt{\epsilon} \\ b & a & \sqrt{\epsilon} \\ \sqrt{\epsilon} & \sqrt{\epsilon} & -(a+b) \end{bmatrix} \quad \text{donde} \quad \begin{cases} a = -\frac{1}{2}(1 - \sqrt{1 - 2\epsilon}) \\ b = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{1 - 2\epsilon}) \end{cases} \quad (4.5)$$

donde $0 \leq \epsilon \leq 1/2$ puede interpretarse como la intensidad del acople de la punta de prueba al sistema. Así, especificado este parámetro podemos calcular todos los coeficientes de transmisión $T_{ij} = |S'_{ij}|^2$ y, con ellos, el voltaje.

Para tratar estadísticamente el voltaje empleamos la matriz de transferencia M . Dado que la matriz $\tilde{S}^{(12)}$ está tomada desde dos puntos de referencia, podemos relacionarla con una matriz de transferencia \tilde{M} con los mismos puntos de referencia, dada por

$$\tilde{r} = -\frac{\tilde{\beta}^*}{\tilde{\alpha}^*} \quad \tilde{t} = \frac{1}{\tilde{\alpha}^*} \quad \tilde{r}' = \frac{\tilde{\beta}}{\tilde{\alpha}^*} \quad (4.6)$$

mientras que la matriz de transferencia M con un solo origen (situado en el centro del conductor) viene dada por un desplazamiento en las fases de las amplitudes de onda:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \tilde{\alpha} & \tilde{\beta} \\ \tilde{\beta}^* & \tilde{\alpha}^* \end{bmatrix}}_{\tilde{M}} = \underbrace{\begin{bmatrix} e^{ikL/2} & 0 \\ 0 & e^{-ikL/2} \end{bmatrix}}_M \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \beta^* & \alpha \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} e^{ikL/2} & 0 \\ 0 & e^{-ikL/2} \end{bmatrix}}_M \quad (4.7)$$

De esta forma, las expresiones (4.2), (4.4), (4.6) y (4.7) nos dan la diferencia de potencial v como función de $\alpha, \alpha^*, \beta, \beta^*$.

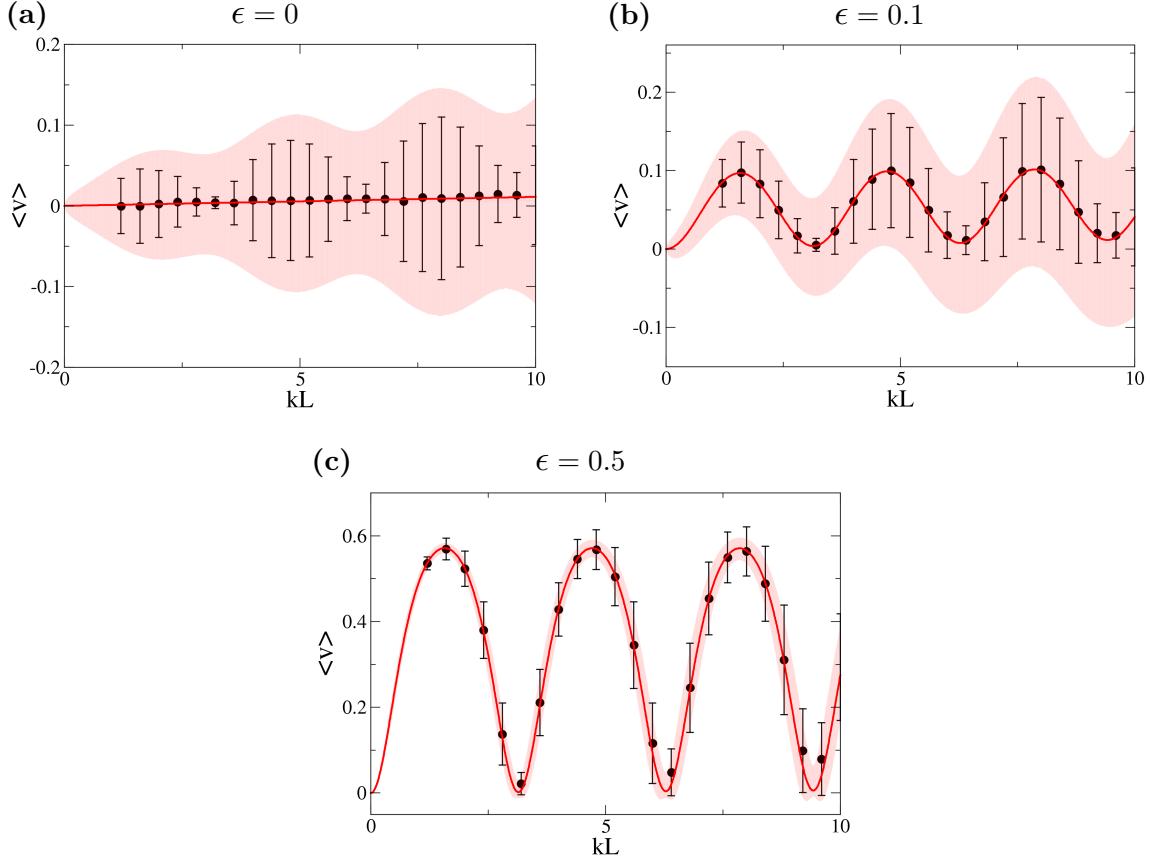


Figura 6: Valor promedio de la diferencia de potencial v medida en una red unidimensional para tres valores del acople ϵ de los terminales 3 y 4. Los puntos experimentales se contrastan con el promedio (línea roja) y desviación estándar (zona sombreada) teóricos calculados mediante (4.8).

Utilizando la expresión (2.23) podemos calcular cantidades de relevancia estadística como el voltaje medio y la varianza del voltaje. Los cálculos son sumamente complicados, pero estos se ven simplificados asumiendo un conductor débilmente desordenado ($s \ll 1$). De esta forma podemos hacer una expansión del voltaje y su varianza hasta términos de orden s :

$$\begin{aligned}
\langle v \rangle &\approx [\langle v \rangle]_{1100} + \left[\frac{\partial \langle v \rangle}{\partial s} \right]_{1100} s = \\
&= [\langle v \rangle]_{1100} + \left[\frac{\partial^2 v}{\partial \alpha \partial \alpha^*} + \frac{\partial^2 v}{\partial \beta \partial \beta^*} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 v}{\partial \alpha^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 v}{\partial \alpha^{*2}} \right]_{1100} s \\
(\delta v)^2 &= \langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2 \approx [\langle v^2 \rangle]_{1100} + \left[\frac{\partial \langle v^2 \rangle}{\partial s} \right]_{1100} s - \langle v \rangle^2 = \\
&= \left[2 \frac{\partial v}{\partial \alpha} \frac{\partial v}{\partial \alpha^*} + 2 \frac{\partial v}{\partial \beta} \frac{\partial v}{\partial \beta^*} - \left(\frac{\partial v}{\partial \alpha} \right)^2 - \left(\frac{\partial v}{\partial \alpha^*} \right)^2 \right]_{1100} s
\end{aligned} \tag{4.8}$$

donde $[.]_{1100}$ denota evaluar la expresión en $\alpha = \alpha^* = 1$ y $\beta = \beta^* = 0$. Calculando las derivadas, puede demostrarse que $\langle v \rangle = s/2$ para $\epsilon = 0$.

Antes de estudiar el voltaje en nanocintas de grafeno presentamos los resultados para una red unidimensional con cuatro puntas de prueba. En la figura (6) se contrasta la teoría con el cálculo numérico en una red unidimensional con $l = 2000$ ($kl = 400$), en la que se muestra tanto el voltaje promedio como su desviación estándar. Notemos que únicamente en el caso de acople nulo el voltaje varía linealmente con L . En los otros casos el voltaje oscila en contraste con el caso macroscópico. Vemos que los resultados siguen la tendencia predicha por la teoría, aunque la desviación estándar teórica queda un poco sobreestimada para acoplos pequeños. Además, puede apreciarse que, aunque el voltaje promedio siempre es positivo, existe una probabilidad no nula de medir voltajes negativos, especialmente para acoplos pequeños.

5 Propiedades electrónicas del grafeno

La muestra conductora que vamos a estudiar en el montaje de la figura (5) es una nanocinta de grafeno. El grafeno es un material bidimensional formado por átomos de carbono dispuestos según una red hexagonal. El carbono ($[\text{He}]2s^22p^4$), al ser tetravalente, forma tres enlaces de hibridación sp^2 con sus tres primeros vecinos, mientras que el electrón restante del orbital p_z es el que participa en las propiedades de conducción. Además, al ser una red bipartita, puede dividirse en dos redes no equivalentes, describiendo así la red mediante una red de Bravais triangular junto con una base de dos átomos (figura (7a)). Mencionar que la distancia entre primeros vecinos es $a_0 = 1.42 \text{ \AA}$ y el parámetro de red $a = \sqrt{3}a_0$ [14].

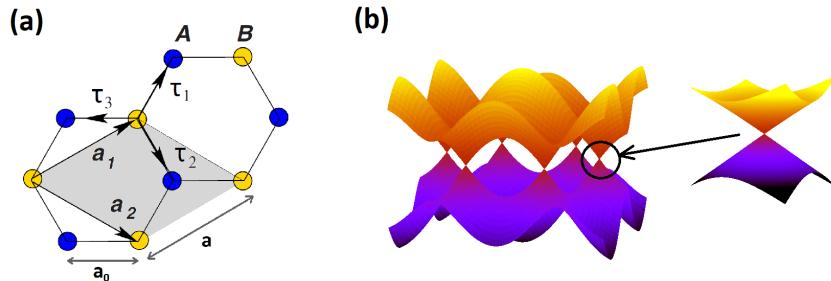


Figura 7: (a) Red cristalina hexagonal: cada una de las dos subredes (A y B) se representa en un color, y la zona sombreada es la celda unidad. Imagen modificada de [16]. (b) Representación en el espacio de momentos de la ecuación (5.1). En los puntos K^\pm de la primera zona de Brillouin la relación de dispersión es lineal. A la relación de dispersión cerca de estos puntos se le llama 'conos de Dirac'.

5.1 Estructura de bandas del grafeno

Para describir las propiedades electrónicas del grafeno podemos obtener su estructura de bandas a partir de un modelo *tight-binding* [17] (este modelo se desarrolla en más detalle en el apartado (3.1)). Diagonalizando el hamiltoniano del modelo (Anexo A) se obtiene la siguiente relación de dispersión, mostrada en la figura (7b):

$$E(\mathbf{k}) = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos^2 \frac{k_x a}{2} + 4 \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{\sqrt{3} k_y a}{2}} \quad (5.1)$$

donde $t = 2.74 \text{ eV}$ [14] es la integral de *hopping*, es decir, la energía necesaria para que un electrón en un átomo salte a un átomo vecino.

Puede comprobarse que esta función se anula en seis puntos, que se clasifican en dos puntos no equivalentes, llamados puntos de Dirac: $K^+ = \frac{2\pi}{a} (\frac{2}{3}, 0)$ y $K^- = \frac{2\pi}{a} (-\frac{2}{3}, 0)$. En estos puntos la banda de valencia y la de conducción entran en contacto, haciendo que el grafeno se comporte como un semiconductor sin *gap*. Además, en un entorno de los puntos de Dirac la relación de dispersión es lineal, comportándose así los electrones como fermiones relativistas sin masa efectiva, ya que su relación de dispersión es igual que la de los fotones, pero con velocidad de grupo $v_F = 3a_0 t / 2\hbar = 10^6 \text{ m/s}$.

5.2 Nanocintas de grafeno

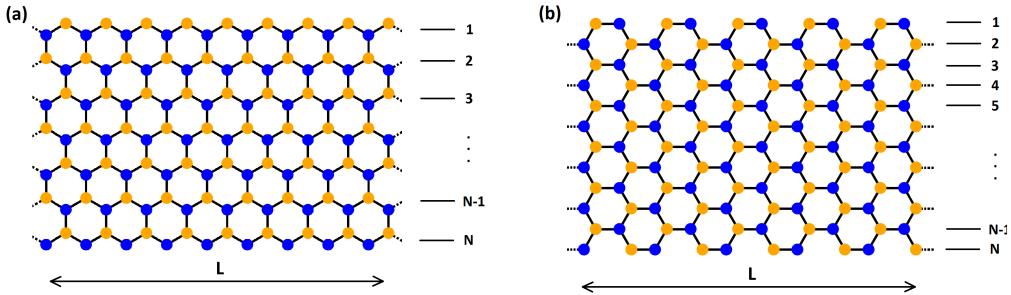


Figura 8: Las dos geometrías básicas de nanocintas de grafeno: (a) Zigzag y (b) Armchair. La anchura N se define según el número de cadenas (zigzag) o según el número de dímeros en la dirección trasversal (armchair).

Una de las geometrías que pueden formarse a partir del grafeno son las nanocintas, construidas a partir de dos cortes paralelos en la red del grafeno. Según la dirección del corte pueden obtenerse dos tipos de nanocintas (zigzag y armchair) o una combinación de ambas, como se muestra en la figura (8). La diferencia entre ambas reside en la geometría de los ejes, que les proporciona propiedades electrónicas muy diferentes. Ambos casos se analizan en detalle en el Anexo B.

En el caso de nanocintas tipo armchair, la estructura de bandas se muestra en la figura (9a). En general el sistema presenta un *gap* de energía en torno al nivel de Fermi, pero cuando la anchura es $N = 3r - 1$ ($r \in \mathbb{N}$) el *gap* se anula y el sistema se vuelve metálico. En este caso, en el centro de la banda ($E = 0, k = 0$) los estados electrónicos son funciones de onda extensas, tal como se muestra en la figura (9b).

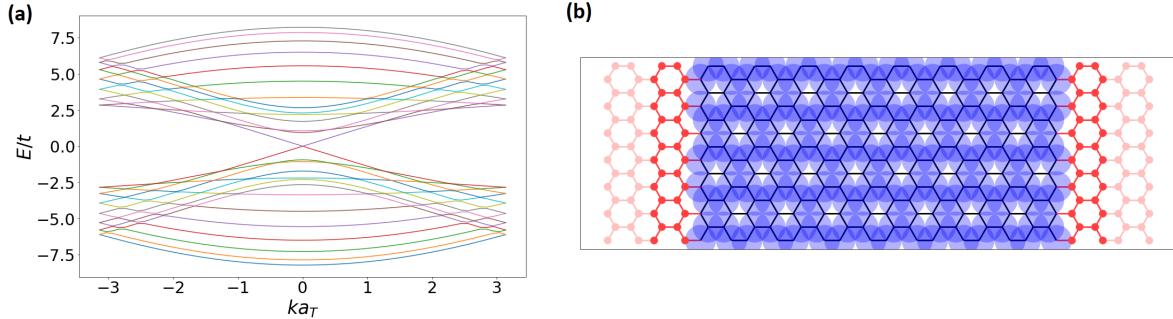


Figura 9: (a) Estructura de bandas de una nanocinta armchair metálica con anchura $N = 14$. (b) En color azul, módulo al cuadrado de la función de onda en el centro de la banda ($k = 0$).

En el caso de nanocintas tipo zigzag la situación es diferente. Para $|ka| > 2\pi/3$ aparece una banda de energía en torno a $E = 0$ prácticamente plana, es decir, con velocidad de grupo casi nula. Los autoestados del hamiltoniano en esta banda pueden interpretarse como funciones de onda concentradas en los bordes. Para $ka = \pi$, la función de onda queda completamente concentrada en el borde zigzag (figura (10b)), mientras que al variar k se suprime exponencialmente al alejarse del borde (figura (10c)).

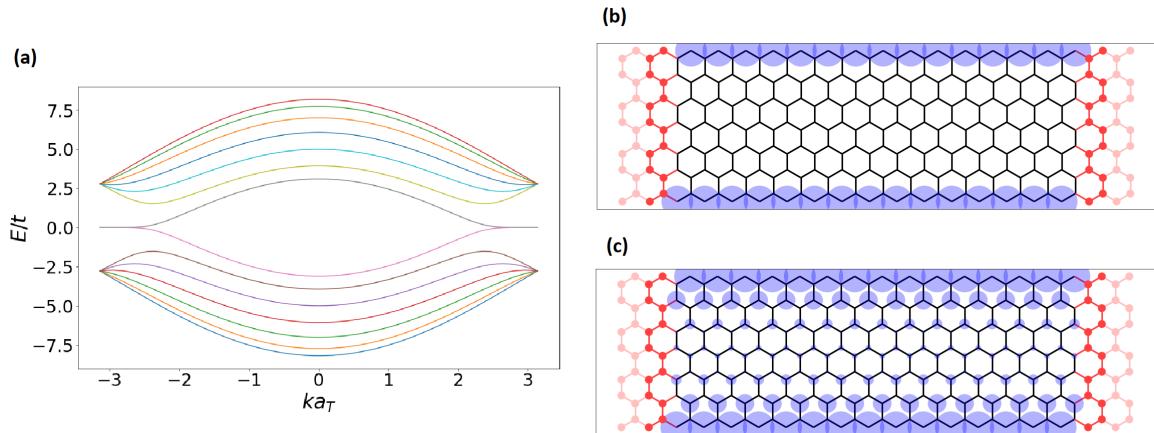


Figura 10: (a) Estructura de bandas de una nanocinta zigzag con anchura $N = 7$. (b) En color azul, módulo al cuadrado de la función de onda en el centro de la banda ($ka \sim \pi$). (c) En color azul, módulo al cuadrado de la función de onda ligeramente fuera del centro de la banda ($ka = 2.35$).

Vemos, por tanto, que la geometría de las nanocintas tiene consecuencias muy importantes sobre las propiedades electrónicas de la muestra. En el caso zigzag, la función de onda se

encuentra concentrada en los bordes, haciendo del transporte un problema esencialmente unidimensional. En cambio, en el caso armchair, la función de onda se concentra a lo largo y ancho de la red, haciendo del transporte un problema bidimensional.

5.3 Localización

Como habíamos visto, en un sistema unidimensional desordenado se produce un fenómeno de interferencia llamado localización de Anderson, por el cual las funciones de onda se localizan exponencialmente. Este será el caso de los estados electrónicos en las nanocintas zigzag en el centro de la banda. Para las nanocintas armchair, en cambio, se observa localización anómala para los estados en el centro de la banda [8].

En la figura (11) se muestra la distribución $P(G)$ de la expresión (2.20) junto con la distribución obtenida mediante cálculo numérico para los dos tipos de nanocintas. Ambas distribuciones se han tomado con igual promedio $\langle G \rangle = 0.34$ a energía $E = 10^{-6}$. Puede apreciarse que, efectivamente, el caso zigzag se comporta como un sistema unidimensional con localización de Anderson, pues se ajusta perfectamente a la distribución teórica, mientras que el armchair sigue una distribución distinta debido a la localización anómala. Esto lo confirma también el inset de la figura, donde para el caso zigzag $\langle -\ln(G) \rangle = L/l$, con $l = 63$, propio de la localización de Anderson; mientras que en el caso armchair $\langle -\ln(T) \rangle \propto L^\alpha$, con $\alpha = 0.66$, de acuerdo con las expresiones (2.21) y (2.22).

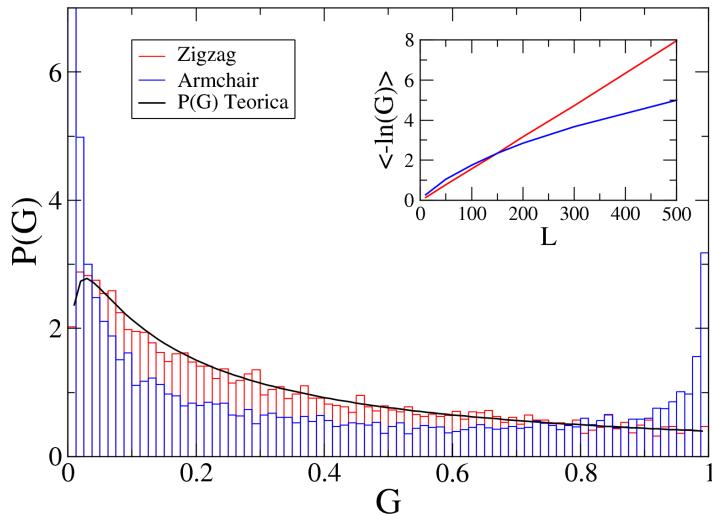


Figura 11: Histogramas de $P(G)$ para el caso zigzag (rojo) y armchair (azul). La curva teórica de (2.20) se muestra en línea continua. Inset: dependencia de $\langle -\ln(G) \rangle$ con la longitud L del sistema, contrastando la localización de Anderson ($\langle -\ln(G) \rangle \propto L$) y anómala ($\langle -\ln(G) \rangle \propto L^\alpha$).

6 Resultados

Con todo lo visto hasta ahora ya podemos abordar el problema multiterminal para nanocintas de grafeno. Los resultados numéricos, como ya se ha explicado, se obtienen por medio del software *Kwant*. Para ello creamos un sistema *tight-binding* hexagonal con las dos posibles geometrías que definen las nanocintas de grafeno: armchair y zigzag, y lo conectamos por sus dos extremos a dos contactos de grafeno sin imperfecciones. Así, si el sistema central no está desordenado, la transmisión será $T = 1$.

El desorden puede introducirse en el hamiltoniano (3.3) de dos formas: en la diagonal o en los elementos fuera de esta. En este trabajo se opta por estudiar el segundo caso, pues en las nanocintas tipo armchair un desorden no-diagonal causa la aparición de estados anómalamente localizados [9], permitiéndonos estudiar su efecto en el voltaje. Además, este desorden modela una red realista en la que se producen pequeñas deformaciones en su fabricación. Así, mantenemos en el hamiltoniano $\epsilon_i = 0$, pero generamos los coeficientes t_{ij} aleatoriamente como

$$t_{ij} = t_0 \pm w_{ij} \quad (6.1)$$

donde $t_0 = 2.74 \text{ eV}$ y w_{ij} una variable aleatoria generada según una distribución uniforme en $(-W, W)$. Las magnitudes promedio como el voltaje $\langle v \rangle$ o la conductancia (transmisión) $\langle G \rangle$ se calculan tomando múltiples ($\sim 10^3 - 10^4$) realizaciones del mismo sistema.

Además, se van a estudiar dos situaciones: primero vamos a estudiar el voltaje $v = (\mu_3 - \mu_4)/(\mu_1 - \mu_2)$ cuando los electrones inyectados tienen energías $E \neq 0$, es decir, fuera del centro de la banda; y después estudiaremos el caso de $E \rightarrow 0$.

Cabe destacar que todas las magnitudes con dimensiones de longitud están dadas en unidades del parámetro de red a , así como los vectores de onda. Igualmente, las energías vienen dadas en unidades del parámetro *tight-binding* t .

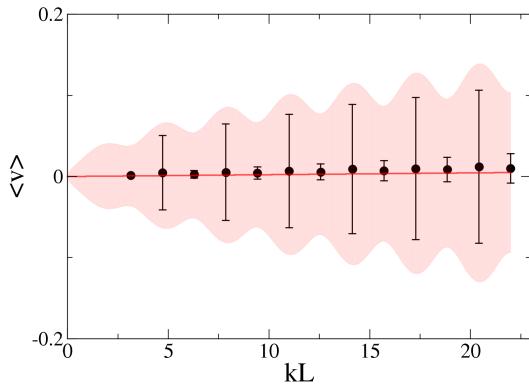
6.1 Energía fuera del centro de la banda

Para energías alejadas del centro de la banda, cualquier desorden causa localización de Anderson, lo cual se refleja en la distribución $P(G)$ y, en particular, en la dependencia $\langle -\ln(G) \rangle = L/l$.

En una sección anterior se ha contrastado el valor teórico del voltaje para una red unidimensional. Ahora lo contrastamos con nanocintas de grafeno. En general, la teoría de matrices aleatorias empleada no es válida para sistemas bidimensionales como lo es el grafeno. Sin embargo, la particularidad de las nanocintas es que en un entorno del nivel de Fermi, al contrario que en otras redes bidimensionales, existe un solo canal de energía abierto. Esto permite usar la teoría de matrices aleatorias del caso estrictamente unidimensional.

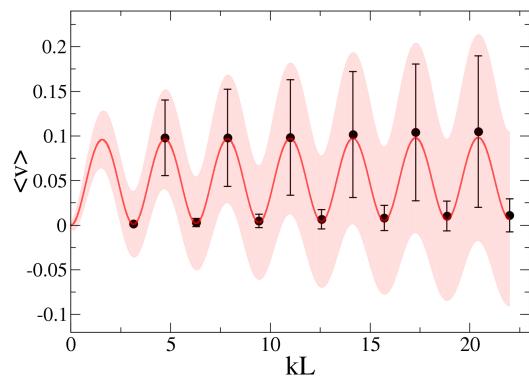
$\epsilon = 0$

(a)



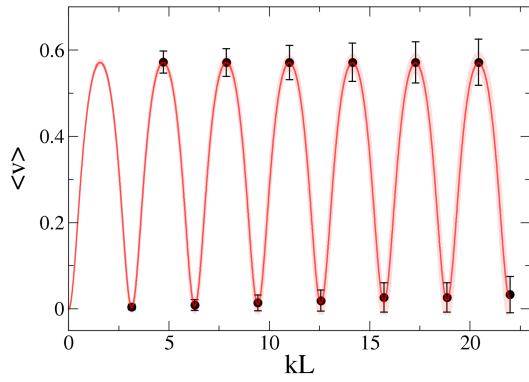
$\epsilon = 0.1$

(b)

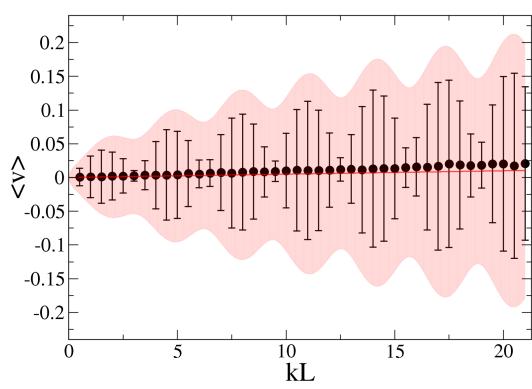


$\epsilon = 0.5$

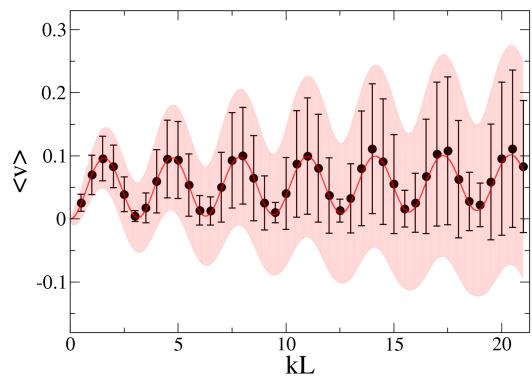
(c)



(d)



(e)



(f)

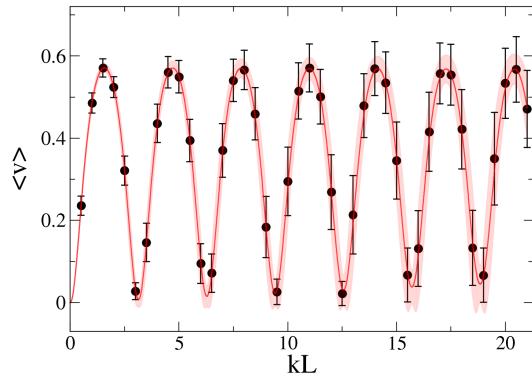


Figura 12: Voltaje v según la expresión (4.2) como función de la longitud del sistema, y el promedio (línea roja) y desviación estándar (zona sombreada) teóricos según (4.8). Se muestra en las figuras (a), (b) y (c) el voltaje en una nanocinta zigzag ($N = 5$) para tres valores del acoplamiento ϵ de las puntas de prueba; y en las figuras (d), (e) y (f) la misma situación para la nanocinta armchair ($N = 8$).

En la figura (12) se muestran estos resultados numéricos junto con el valor teórico del voltaje para distintos valores del acople de las puntas de prueba, ϵ . El caso zigzag se muestra en las figuras (a), (b) y (c), donde se ha empleado una energía $E = 1.77$ ($k = \pi/2$) y $l = 720$; y el caso armchair se muestra en las figuras (d), (e), y (f), donde se emplea $E = 0.69$ ($k = 0.5$) y $l = 1000$. Puede verse una buena concordancia entre los resultados teóricos y los numéricos para ambas nanocintas, aunque al igual que en el caso unidimensional las desviaciones estándar quedan sobreestimadas. Así, verificamos que se aproximan a un comportamiento unidimensional, siempre y cuando la energía sea tal que solamente haya un canal abierto.

Además, es interesante contrastar estos resultados con los que esperaríamos de un conductor macroscópico. En el caso $\epsilon = 0$ tenemos el caso de dos puntas de prueba que 'sienten' el voltaje local, lo que clásicamente sería un voltímetro con resistencia interna infinita. En ese caso esperaríamos un voltaje directamente proporcional a la resistencia, es decir, $v \propto L$. Esto coincide con las observaciones en el régimen cuántico, aunque existe una diferencia importante: la anchura de la distribución de v oscila con la longitud, dando lugar a una alta probabilidad de medir diferencias de potencial negativas.

En los casos $\epsilon \neq 0$ la situación es distinta: tanto el voltaje como su desviación estándar oscilan con L , disminuyendo además la probabilidad de medir voltajes negativos a medida que aumenta ϵ . Estas oscilaciones pueden entenderse como producto de la influencia de las puntas de prueba, que al no estar débilmente acopladas proporcionan nuevos mecanismos de dispersión a los electrones, dando lugar a interferencias constructivas y destructivas.

6.2 Energía en el centro de la banda

Para energía $E \approx 0$, los estados en el caso zigzag se localizan Anderson, pero en el caso armchair lo hacen anómalamente. Por tanto, esperamos encontrar esta diferencia reflejada en el voltaje.

Debido a la forma de la estructura de bandas de las dos nanocintas solamente tiene sentido estudiar el caso de acople $\epsilon = 0$. En el caso zigzag, para $E \rightarrow 0$ tenemos $k \rightarrow \pi$, por lo que se tendría poca densidad de puntos en el eje kL ; mientras que en el caso armchair, para $E \rightarrow 0$ tenemos $k \rightarrow 0$, por lo que sería necesario considerar sistemas de longitudes inabarcables computacionalmente.

Por ello, se ha optado por estudiar la evolución del voltaje para $\epsilon = 0$ frente al parámetro de localización, $\langle -\ln(T) \rangle$, realizando los cálculos a la misma energía para ambas nanocintas ($E \sim 10^{-8}$). Estos resultados se muestran en la figura (13).

En primer lugar, puede observarse en el inset cómo en el caso zigzag se produce localización de Anderson, ya que $\langle -\ln(T) \rangle = L/l$ con $l = 45$. En cambio, en el caso armchair la dependencia es propia de una localización anómala, $\langle -\ln(T) \rangle = aL^\alpha$, con $\alpha = 0.7$ y $a = 0.06$.

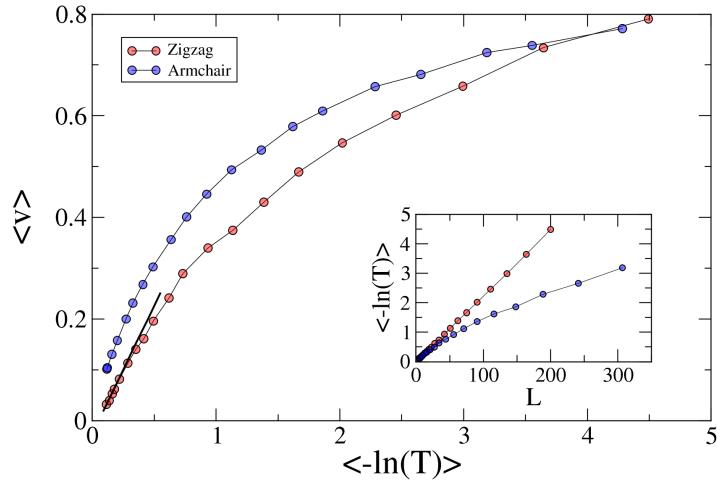


Figura 13: Voltaje v medido a energías cercanas a cero como función del parámetro de localización, comparando los casos zigzag ($N = 5$) y armchair ($N = 8$). Cerca del origen se muestra en línea continua la recta $\langle v \rangle = s/2$. Inset: dependencia de $\langle -\ln(T) \rangle$ con la longitud del sistema.

En segundo lugar, en la figura principal puede verse que, para $\langle -\ln(T) \rangle \rightarrow 0$, el voltaje en la nanocinta zigzag sigue la dependencia $\langle v \rangle = s/2$ predicha para el caso unidimensional. Este no es el caso para la nanocinta armchair, donde la dependencia es distinta. Adicionalmente, puede observarse que la diferencia de potencial para el caso armchair es consistentemente mayor. Esto, intuitivamente, podemos entenderlo de la siguiente forma: dado un valor fijo de $\langle -\ln(T) \rangle$, la longitud L en el zigzag es menor (ver inset) que en el armchair luego, dado que uno esperaría que la resistencia escalase con la longitud, en el caso zigzag la resistencia sería menor y, por tanto, también el voltaje.

7 Conclusiones

En este trabajo hemos estudiado la diferencia de potencial v en un montaje de cuatro puntas de prueba como el de la figura (1), utilizando como muestra conductora una nanocinta de grafeno con imperfecciones en su red. En particular hemos obtenido el promedio y la varianza del voltaje como función de la distancia entre las puntas de prueba para los dos tipos de nanocintas de grafeno: armchair y zigzag. Todo nuestro análisis se ha realizado a bajas energías donde un solo canal contribuye al transporte.

Hemos estudiado la diferencia de potencial teóricamente desde una teoría de transporte cuántico basada en los procesos de *scattering* y desde un modelo estadístico de teoría de matrices aleatorias. Este voltaje se expresa en las ecuaciones (4.2), (4.4), (4.6) y (4.7) como una función de los parámetros de la matriz de transferencia M , pudiendo así aplicar el modelo estadístico (2.23) para calcular el primer y segundo momentos de la distribución.

Los estudios realizados con las dos posibles geometrías en una nanocinta de grafeno (zigzag y armchair) muestran un comportamiento unidimensional en el transporte para energías fuera del centro de la banda, localizándose los estados exponencialmente ($\langle -\ln(T) \rangle = L/l$) en presencia de desorden, y como consecuencia $\langle G \rangle \propto e^{-L/l}$. En el centro de la banda, en cambio, las nanocintas tipo zigzag mantienen su comportamiento unidimensional y los estados se localizan exponencialmente, mientras que en las nanocintas tipo armchair los estados se localizan de manera anómala ($\langle -\ln(T) \rangle \propto L^\alpha$) y, como consecuencia, $\langle G \rangle \propto L^{-\alpha}$.

Los resultados de la figura (12) muestran la evolución del voltaje con la longitud L del sistema, suponiendo el límite de bajo desorden. Estos resultados muestran una buena concordancia entre la teoría desarrollada para sistemas unidimensionales y las nanocintas de grafeno que, a pesar de ser bidimensionales, tienen un comportamiento esencialmente unidimensional.

En la figura (13) se muestra la evolución del voltaje con el parámetro de localización para un desorden arbitrario, mostrando así la existencia de una diferencia en el voltaje cuando la localización en el transporte es exponencial o anómala.

Adicionalmente, hemos estudiado el voltaje en muestras de conductores unidimensionales, observando un buen acuerdo con los resultados teóricos basados en la teoría de matrices aleatorias.

Referencias

- [1] Datta, S. (1995). Electronic Transport in Mesoscopic Systems (Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering). Cambridge: Cambridge University Press. doi:10.1017/CBO9780511805776
- [2] Büttiker, M. (1986). Four-Terminal Phase-Coherent Conductance. *Phys. Rev. Lett.*, 57, 1761–1764. doi:10.1103/PhysRevLett.57.1761
- [3] Ferry, D., Goodnick, S., & Bird, J. (2009). Transport in Nanostructures (2nd ed.). Cambridge: Cambridge University Press. doi:10.1017/CBO9780511840463
- [4] Mello, P. A., & Kumar, N. (2004). Quantum Transport in Mesoscopic Systems.
- [5] Beenakker, C. (1997). Random-matrix theory of quantum transport. *Rev. Mod. Phys.*, 69, 731–808.
- [6] Mello, & Tomsovic (1992). Scattering approach to quantum electronic transport. *Physical review. B, Condensed matter*, 46 24, 15963-15981 .
- [7] Fleishman, L., & Licciardello, D. C. (1977). Fluctuations and localization in one dimension. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 10(6), L125. doi:10.1088/0022-3719/10/6/003
- [8] Kleftogiannis, I., Amanatidis, I., & Gopar, V. (2013). Conductance through disordered graphene nanoribbons: Standard and anomalous electron localization. *Phys. Rev. B*, 88, 205414.
- [9] Inui, M., Trugman, S., & Abrahams, E. (1994). Unusual properties of midband states in systems with off-diagonal disorder. *Phys. Rev. B*, 49, 3190–3196.
- [10] Amanatidis, I., Kleftogiannis, I., Falceto, F., & Gopar, V. A. (2017). Coherent wave transmission in quasi-one-dimensional systems with Lévy disorder. *Physical review. E*, 96(6-1), 062141. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.96.062141>
- [11] Gopar, V. A., Martínez, M., & Mello, P. A. (1994). Random-matrix study of multiprobe mesoscopic devices. II. A four-probe one-dimensional system. *Phys. Rev. B*, 50, 2502–2509. doi:10.1103/PhysRevB.50.2502

- [12] Buttiker, M., Imry, Y., & Azbel, M. (1984). Quantum oscillations in one-dimensional normal-metal rings. *Phys. Rev. A*, 30, 1982–1989.
- [13] C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, X. Waintal, Kwant: a software package for quantum transport, *New J. Phys.* 16, 063065 (2014).
- [14] Kundu, R. (2009). Tight binding parameters for graphene. *Modern Physics Letters B*. 25. 10.1142/S0217984911025663.
- [15] Raza, H. (Ed.). (2012). Graphene Nanoelectronics (2012th ed.). doi:10.1007/978-3-642-22984-8
- [16] Neto, A.H., Guinea, F., Peres, N.M., Novoselov, K.S., & DUTTASINHA, S. (2007). Electronic properties of graphene. *physica status solidi (b)*, 244.
- [17] Wakabayashi, K., Sasaki, K. I., Nakanishi, T., & Enoki, T. (2010). Electronic states of graphene nanoribbons and analytical solutions. *Science and technology of advanced materials*, 11(5), 054504. <https://doi.org/10.1088/1468-6996/11/5/054504>
- [18] Del Castillo Hernández, Y. (2020, October 7). Quantum Transport in Graphene Atomic-sized Contacts.