

Transporte electrónico en nanocintas de siliceno dopadas

K. A. Gonzalez ^{†1}, C. D. Nunez¹, L. Rosales¹ y P. A. Orellana¹

kevin.gonzalez@sansano.usm.cl

¹Departamento de Física, Universidad Técnica Federico Santa María, Casilla 110-V, Valparaíso, Chile.

March 30, 2022

1 Resumen

Estudiamos las propiedades de transporte de una estructura de nanocintas de siliceno completamente dopada con impurezas ("adatoms") en una región central. Usando el modelo de enlace fuerte, es posible mapear la red hexagonal del siliceno en una cadena unidimensional diatómica con parámetros de acoplamientos alternados entre átomos vecinos. Determinamos analíticamente la función de transmisión del sistema considerando el potencial efectivo generado por las impurezas, así como un campo eléctrico externo aplicado perpendicular a la nanoestructura.

2 Introducción

El siliceno es el análogo de silicio del grafeno [1]. Estos materiales bidimensionales comparten una estructura reticular de panal de abeja común [2, 3, 4], pero el radio iónico más grande del silicio induce un pandeo de la red [2, 4]. Por lo tanto, las dos subredes de la red de panal no son coplanares en el siliceno y los cálculos de los primeros principios sugieren que la interacción espín-órbita abre una brecha considerable en el punto de Dirac del orden de 1,55 meV [5]. Sorprendentemente, la estructura combada del siliceno permite controlar la magnitud del espacio mediante la aplicación de un campo eléctrico perpendicular [6]. La banda prohibida en función del campo eléctrico presenta un perfil W característico y se cierra a una magnitud crítica del campo [6]. El interés en el siliceno sintetizado artificialmente como material de elección para la nanoelectrónica [7] está motivado por la dificultad inherente de abrir una brecha electrónica en el grafeno. El siliceno podría en principio ofrecer una alternativa para superar esta limitación que se encuentra en el grafeno debido a que su estructura alabeada favorece la apertura de un espacio que puede ser controlado adicionalmente por un campo eléctrico. En este contexto, Tao et al informaron recientemente sobre la fabricación de un transistor de efecto de campo de siliceno de una sola capa que opera a temperatura ambiente [8].

3 Modelo

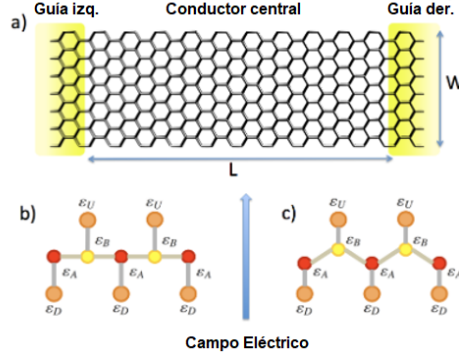


Figura 1: a) Vista esquemática de las nanocintas consideradas; b) Vista lateral de una nanoestructura plana, c) Vista lateral de una nanoestructura no plana. En ambos paneles, $\varepsilon_{(U,D)}$ representa la energía de sitio de los "adatoms" fijados en los sitios A(B) de la nanocinta.

Consideramos nanocintas en forma de "armchair" divididas en tres regiones: dos guías semi-infinitas y un conductor central con "adatoms" ligados a los sitios A(B) del cristal.

El Hamiltoniano general de la nanocinta hexagonal se puede escribir en el modelo de enlace fuerte como[9]:

$$H_T = \sum_{\substack{i=1 \\ \beta \in \{A,B\}}}^N \varepsilon_i^\beta c_i^{\beta\dagger} c_i^\beta + \gamma \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ \beta \in \{A,B\}}} (c_i^{\beta\dagger} c_j^\beta + h.c.), \quad (1)$$

Donde c_i^β ($c_i^{\beta\dagger}$) son los operadores electrónicos de destrucción (creación), γ es el parámetro de acoplamiento ("hopping") entre los átomos vecinos más cercanos y ε_i^β la energía de sitio del i -ésimo átomo A(B) de la nanocinta.

Por simplicidad, podemos fijar la energía de sitio de las guías izquierda y derecha en $\varepsilon_j = 0$, mientras que en el conductor central, la energía de sitio efectiva:

$$\begin{aligned} \varepsilon_i^A &= \alpha U_E + \frac{\Gamma^2}{\varepsilon - \varepsilon_D} \\ \varepsilon_i^B &= -\alpha U_E + \frac{\Gamma^2}{\varepsilon - \varepsilon_U} \end{aligned} \quad (2)$$

Que resulta de la renormalización de la energía en los sitios A(B) de tal forma que contengan toda la información relevante: los "adatoms" fijados a cada lado de la nanocinta y el potencial electrostático generado por un campo eléctrico externo aplicado, Γ es el acoplamiento entre los "adatoms" y los átomos A(B) de la nanocinta. $U_E = lE$ es el potencial electrostático generado por el campo eléctrico considerando l la separación vertical de ambas subredes de la nanocinta, tal que: $\varepsilon_{U(D)} = \varepsilon_0 \pm U_E$. Además α es el parámetro de pandeo ("buckling") tal que $0 \leq \alpha \leq 1$, donde $\alpha = 0$ quiere decir que la red es plana.

El problema se puede mapear una cadena unidimensional diatómica efectiva, como se muestra en Fig.1.

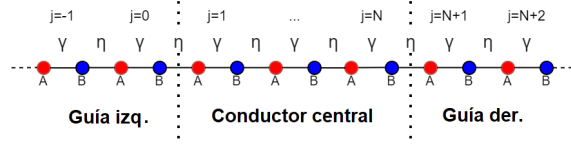


Figura 2: Vista esquemática del modelo unidimensional.

De esta forma las ecuaciones de movimiento para los átomos A(B) son:

$$\begin{aligned} (\varepsilon - \varepsilon_A) \Psi_{j,m}^A &= -\gamma (\Psi_{j-1,m-1}^B + \Psi_{j-1,m+1}^B + \Psi_{j,m}^B), \\ (\varepsilon - \varepsilon_B) \Psi_{j,m}^B &= -\gamma (\Psi_{j+1,m-1}^A + \Psi_{j+1,m+1}^A + \Psi_{j,m}^A). \end{aligned} \quad (3)$$

Y si asumimos una solución de onda plana en la dirección transversal a la nanocinta de la forma $\Psi_{j,m}^{A(B)} = \Phi_j^{A(B)} e^{iq_m m}$ podemos reescribir las ecuaciones anteriores como:

$$\begin{aligned} (\varepsilon - \varepsilon_A) \Phi_j^A &= -\gamma \Phi_j^B - \eta \Phi_{j-1}^B, \\ (\varepsilon - \varepsilon_B) \Phi_j^B &= -\gamma \Phi_j^A - \eta \Phi_{j+1}^A. \end{aligned} \quad (4)$$

Donde $\eta = 2\gamma \cos(q_m)$ es el acoplamiento efectivo entre celdas vecinas y es dependiente de la energía entre los átomos A(B) y q_m es el número de onda electrónico discreto obtenido al imponer una condición de borde de paredes duras (la función de onda es cero en las paredes) en el ancho de la nanocinta. En nanocintas de esta forma se cumple: $q_m = m\pi/(M+1)$, con $m = 1, 2, \dots, M$, que corresponde al número de canales de energía transversal disponibles en la nanocinta.

En las guías, donde $\varepsilon_j = 0$ y $\Phi_j^{A(B)} = A_l(B_l)e^{ikj}$ obtenemos la solución matricial de la forma:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon & (e^{-ik}\eta + \gamma) \\ (e^{ik}\eta + \gamma) & \varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_l \\ B_l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

Y tomando el determinante de la matriz anterior, podemos obtener la relación de dispersión para las guías en este modelo:

$$\varepsilon(k, q_m) = \pm\gamma\sqrt{1 + 4\cos^2 q_m + 4\cos q_m \cos k}, \quad (5)$$

Luego, podemos hacer lo mismo para el conductor central, donde están presentes los "adatoms" a cada lado de la cadena atómica. Aquí se cumple $\Psi_j^{A(B)} = A_c(B_c)e^{ik_c j}$ y las energías de sitio cumplen la ecuación (2) y la solución matricial es:

$$\begin{bmatrix} (\varepsilon - \varepsilon_A) & (e^{-ik_c}\eta + \gamma) \\ (e^{ik_c}\eta + \gamma) & (\varepsilon - \varepsilon_B) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_c \\ B_c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

De la misma forma, obtenemos el determinante y encontramos la relación de dispersión para esta zona:

$$(\varepsilon - \varepsilon_A)(\varepsilon - \varepsilon_B) = \gamma^2 (1 + 4\cos^2 q_m + 4\cos q_m \cos k_c), \quad (6)$$

4 Solución analítica de la transmisión

Para resolver las ecuaciones de movimiento (Ec.4), consideramos condiciones de contorno abiertas. Suponemos ondas planas incidentes desde la izquierda con amplitud unidad, una onda reflejada en el borde de la estructura y una onda transmitida por la derecha. En la zona central del conductor la solución se puede escribir como la superposición de ondas que viajan en las dos direcciones. Con esto la solución general se puede escribir como:

$$|\Psi_j\rangle = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\theta} \end{pmatrix} e^{ikj} + r \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\theta} \end{pmatrix} e^{-ikj}; & \text{para } j \leq 0 \\ A_c \begin{pmatrix} 1 \\ R_c e^{i\theta_c} \end{pmatrix} e^{ik_c j} + B_c \begin{pmatrix} 1 \\ R_c e^{-i\theta_c} \end{pmatrix} e^{-ik_c j}; & \text{para } 1 \leq j \leq N \\ t \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\theta} \end{pmatrix} e^{ikj}; & \text{para } j > N \end{cases} \quad (7)$$

Donde $e^{i\theta}$ en las guías es una fase compleja entre los coeficientes A_l y B_l que sale a partir de la solución matricial. Así mismo el término $R_c e^{i\theta_c}$ dentro del conductor. Además, r y t son las amplitudes de reflexión y transmisión.

Escribimos las siguientes definiciones a partir de las relaciones de dispersión y de la relación entre A_c y B_c para encontrar:

$$\begin{aligned} k &= \arccos \left[\frac{\frac{\varepsilon^2}{\gamma^2} - 1 - 4 \cos q_m^2}{4 \cos q_m} \right] \\ k_c &= \arccos \left[\frac{\frac{\varepsilon - \varepsilon_A}{\gamma} \frac{\varepsilon - \varepsilon_B}{\gamma} - 1 - 4 \cos q_m^2}{4 \cos q_m} \right] \\ R_c &= \sqrt{\frac{\varepsilon - \varepsilon_A}{\varepsilon - \varepsilon_B}} \\ e^{i\theta} &= \frac{-\varepsilon}{\gamma(1 + 2 \cos q_m e^{-ik})} \\ e^{i\theta_c} &= \frac{-(\varepsilon - \varepsilon_A)}{R_c \gamma(1 + 2 \cos q_m e^{-ik_c})} \end{aligned} \quad (8)$$

Consideramos condiciones de contorno en los sitios $j = 0$, $j = 1$, $j = N$ y $j = N + 1$, luego:

$$\begin{aligned} \varepsilon \psi_0^B &= -2\gamma \cos(q_m) \psi_1^A - \gamma \psi_0^A \\ (\varepsilon - \varepsilon_A) \psi_1^A &= -2\gamma \cos(q_m) \psi_0^B - \gamma \psi_1^B \\ (\varepsilon - \varepsilon_B) \psi_N^B &= -2\gamma \cos(q_m) \psi_{N+1}^A - \gamma \psi_N^A \\ \varepsilon \psi_{N+1}^A &= -2\gamma \cos(q_m) \psi_N^B - \gamma \psi_{N+1}^B \end{aligned} \quad (9)$$

Sustituyendo las ecuaciones (7) en (9) encontramos las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned}
e^{ik} + re^{-ik} &= A_c e^{ik_c} + B_c e^{-ik_c} \\
R_c(A_c e^{i\theta_c} + B_c e^{-i\theta_c}) &= e^{i\theta} + re^{-i\theta} \\
A_c e^{-ik_c(N+1)} + B_c e^{-ik_c(N+1)} &= t e^{ik(N+1)} \\
t e^{ikN} e^{i\theta} &= R_c(A_c e^{ik_c N} e^{i\theta_c} + B_c e^{-ik_c N} e^{-i\theta_c})
\end{aligned} \tag{10}$$

Escribiendo las ecuaciones (10) en forma matricial, tenemos:

$$\begin{bmatrix} e^{ik_c} & e^{-ik_c} \\ R_c e^{i\theta_c} & R_c e^{-i\theta_c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_c \\ B_c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ik} + re^{-ik} \\ e^{i\theta} + re^{-i\theta} \end{bmatrix}, \tag{11}$$

$$\begin{bmatrix} e^{ik_c(N+1)} & e^{-ik_c(N+1)} \\ R_c e^{ik_c N} e^{i\theta_c} & R_c e^{-ik_c N} e^{-i\theta_c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_c \\ B_c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ik} \\ e^{i\theta} \end{bmatrix} t e^{ikN}, \tag{12}$$

Renombramos el primer término de la ecuación (11) como R_1 y el primer término de la ecuación (12) como R_2 . De esta forma podemos reescribir la ecuación (12) como:

$$\begin{bmatrix} A_c \\ B_c \end{bmatrix} = R_2^{-1} \begin{bmatrix} e^{ik} \\ e^{i\theta} \end{bmatrix} t e^{ikN},$$

Finalmente reemplazando la ecuación anterior en la ecuación (11):

$$R_1 R_2^{-1} \begin{bmatrix} e^{ik} \\ e^{i\theta} \end{bmatrix} t e^{ikN} = \begin{bmatrix} e^{ik} + re^{-ik} \\ e^{i\theta} + re^{-i\theta} \end{bmatrix}, \tag{13}$$

La ecuación (13) relaciona las amplitudes r y t :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{R_c(e^{ik_c} e^{-i\theta_c} - e^{-ik_c} e^{i\theta_c})} t e^{ikN} (R_c e^{ik} (e^{-ik_c(N-1)} e^{-i\theta_c} - e^{ik_c(N-1)} e^{i\theta_c}) + e^{i\theta} (e^{ik_c N} - e^{-ik_c N})) &= e^{ik} + re^{-ik}, \\
\frac{1}{R_c(e^{ik_c} e^{-i\theta_c} - e^{-ik_c} e^{i\theta_c})} t e^{ikN} (R_c^2 e^{ik} (e^{-ik_c N} - e^{ik_c N}) + e^{i\theta} R_c (e^{ik_c(N+1)} e^{-i\theta_c} - e^{-ik_c(N+1)} e^{i\theta_c})) &= e^{i\theta} + re^{-i\theta},
\end{aligned}$$

Y resolviendo para t obtenemos la transmisión:

$$t = \frac{R_c(e^{ik_c} e^{-i\theta_c} - e^{-ik_c} e^{i\theta_c})(e^{i\theta} - e^{2ik} e^{-i\theta})}{e^{ik} e^{-i\theta} (-2e^{ikN} e^{ik} R_c^2(isen(k_c N)) + R_c e^{i\theta} (isen(k_c(N+1) - \theta_c)) + R_c e^{ik} (isen(k_c(N-1) + \theta_c)) + e^{i\theta} (isen(k_c N)))} \tag{14}$$

Es multiplicando t por su conjugado que finalmente obtenemos la probabilidad de transmisión.

5 Resultados y Análisis

Consideraremos como escala de energía el acoplamiento entre átomos vecinos, $\gamma = 3[eV]$ [10]. En primer lugar graficamos la probabilidad de transmisión en función de la energía en ausencia de campo eléctrico externo aplicado, véase Fig. 3. Lo primero que se puede observar es que el efecto de los "adatoms" solo se aprecia en los valores de energía cercanos a la energía de estos, cuando $\varepsilon \approx \varepsilon_{U,D}$. Por lo que la probabilidad de transmisión en valores de energía no cercanos se comporta como si no hubiera ningún "adatom" presente cuando no hay un campo eléctrico externo aplicado. Podemos observar que el ancho de la nanocinta (aumentando M), y por lo tanto, el número de canales de energía disponibles, aumentan también las degeneraciones de la energía.

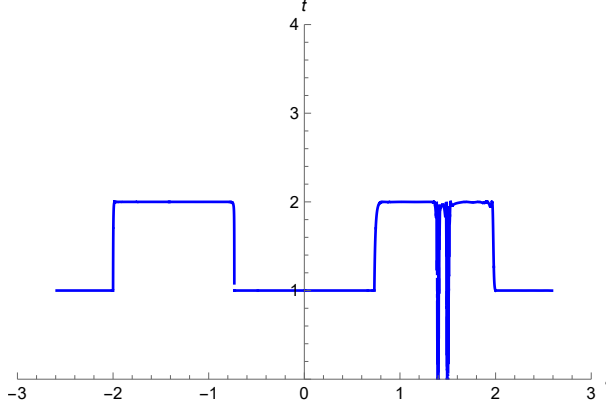


Figura 3.1: Para $M=5$

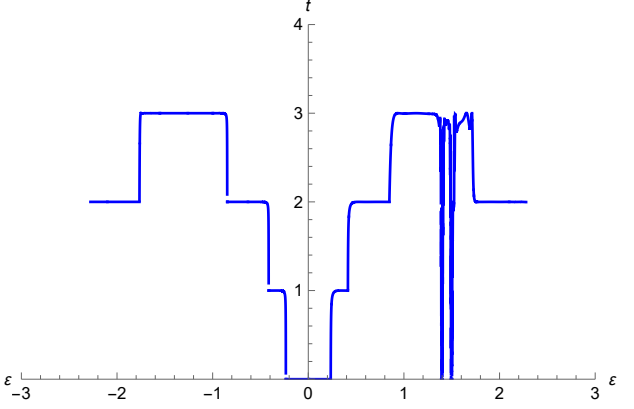


Figura 3.2: Para $M=7$

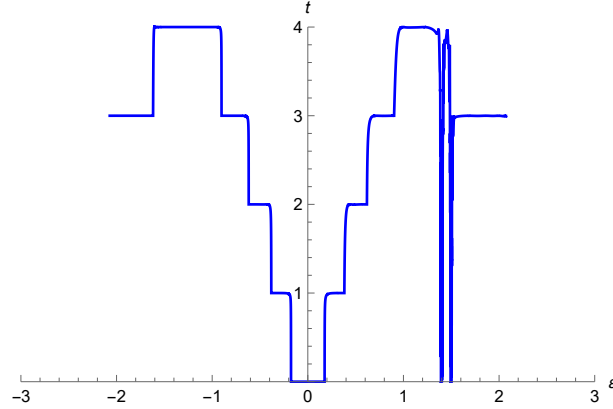


Figura 3.3: Para $M=9$

Figura 3: Probabilidad de transmisión v/s energía en ausencia de campo eléctrico externo aplicado con $N = 12$, $\gamma = 1$ y $\Gamma = 0.1$. $\varepsilon_D = 1.4$ y $\varepsilon_U = 1.5$

Cuando $\varepsilon \approx \varepsilon_{U,D}$ el segundo término de la energía de sitio, en la ecuación (2), tiende a infinito. Lo que significa que la probabilidad de transmisión se hará cero. Si bien esto es esperado, es de interés analizar los valores que rodean $\varepsilon_{U,D}$.

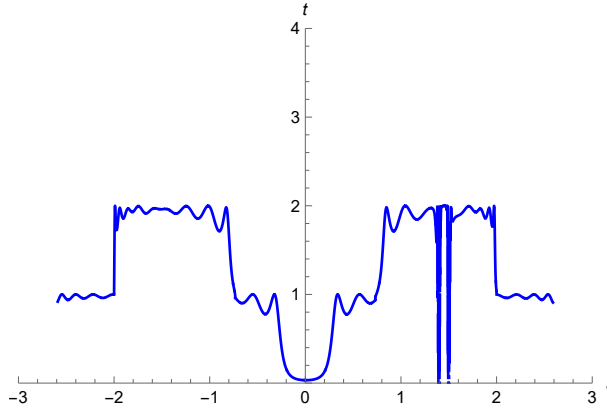


Figura 4.1: Para $N=12$

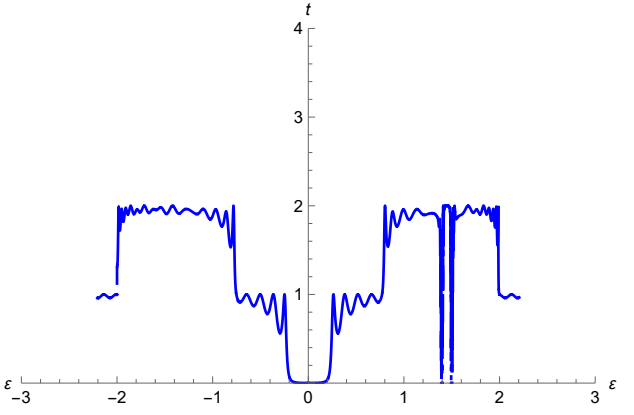


Figura 4.2: Para $N=20$

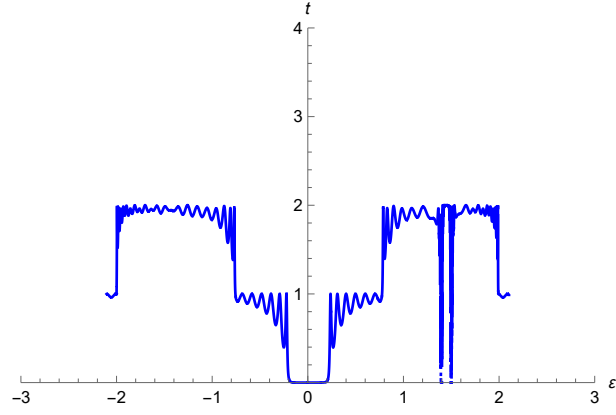


Figura 4.3: Para $N=28$

Figura 4: Probabilidad de transmisión v/s energía con $U_E = 2$ y $\alpha = 0.1$, para $M = 5$ con $\gamma = 1$ y $\Gamma = 0.1$. $\varepsilon_D = 1.4$ y $\varepsilon_U = 1.5$

El efecto del potencial eléctrico solo aparece cuando $\alpha > 0$, es decir, cuando la nanocinta no es plana, y su efecto en valores de la energía no cercanos a $\varepsilon_{U,D}$ es el que se observa en la Figura 4. Según la ecuación (2) los efectos del potencial eléctrico son los mismos que los efectos de α , por lo que podríamos aumentar U_E o α y ver los mismos resultados siempre y cuando ambos sean mayor a cero.

Al aumentar N (es decir, el largo de la nanocinta), notamos un mayor efecto del potencial eléctrico. Es de notar la interferencia que se forma alrededor de $\varepsilon = 0$, que se ve más acentuada al aumentar N y sobre todo al aumentar U_E , como muestra la Figura 5.

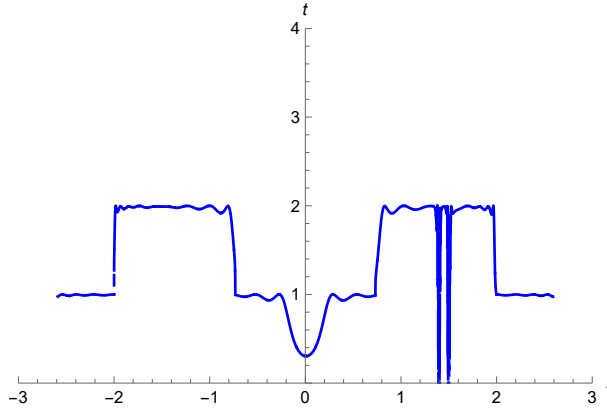


Figura 5.1: Para $U_E = 1$

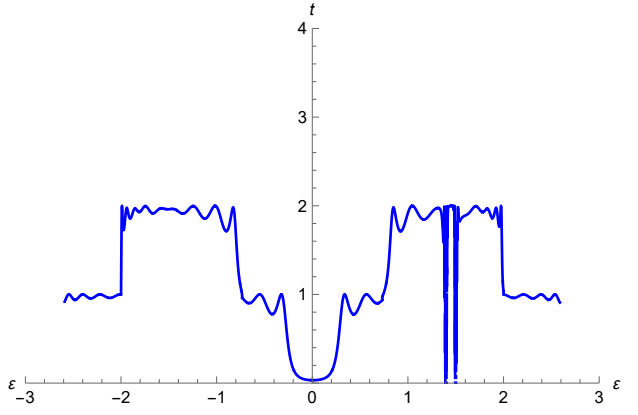


Figura 5.2: Para $U_E = 2$

Figura 5: Probabilidad de transmisión v/s energía con un campo eléctrico externo aplicado para $M = 5$, $\gamma = 1$, $N = 12$, $\Gamma = 0.1$ y $\alpha = 0.1U_E = 2$. $\varepsilon_D = 1.4$ y $\varepsilon_U = 1.5$

El valor de la energía de los "adatoms" $\varepsilon_{U,D}$ sólo cambia dónde ε se hace cero, y este estará dado por qué impureza se está usando, si tenemos impurezas de un mismo tipo ($\varepsilon_U = \varepsilon_D$), solo veremos un valor de la energía que se va a cero. Si tenemos dos átomos distintos como impurezas, uno a cada lado de la red, ($\varepsilon_U \neq \varepsilon_D$), entonces tendremos dos valores donde la energía se va a cero, tal es lo que muestra la Figura 6.

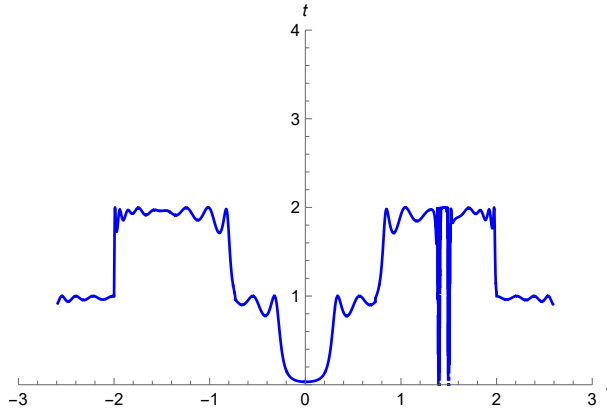


Figura 6.1: Para $\varepsilon_D = 1.4$ y $\varepsilon_U = 1.5$

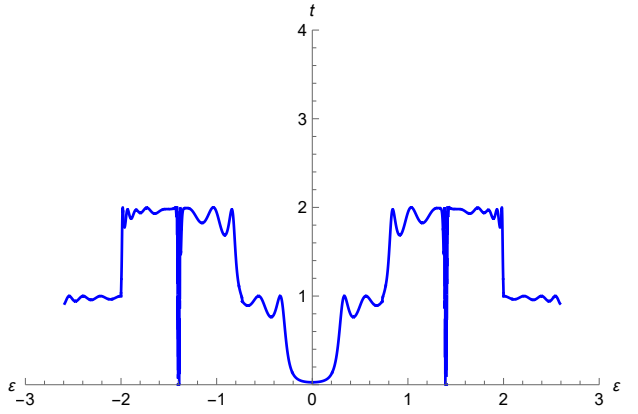


Figura 6.2: Para $\varepsilon_D = 1.4$ y $\varepsilon_U = -1.4$

Figura 6: Probabilidad de transmisión v/s energía con un campo eléctrico externo aplicado para $M = 5$, $\gamma = 1$, $N = 12$, $\Gamma = 0.1$, con $\alpha = 0.1$ y $U_E = 2$

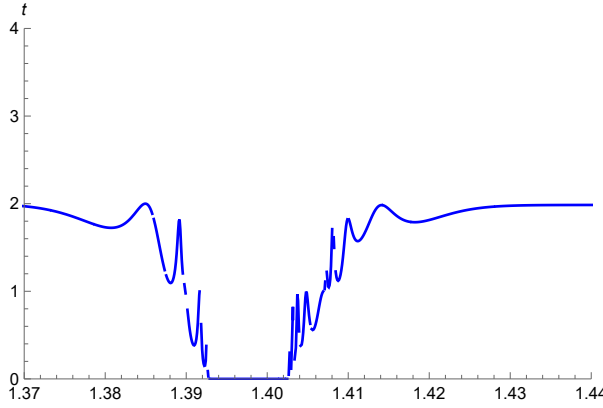


Figura 7.1: Para $\alpha = 0.1$ y $U_E = 2$

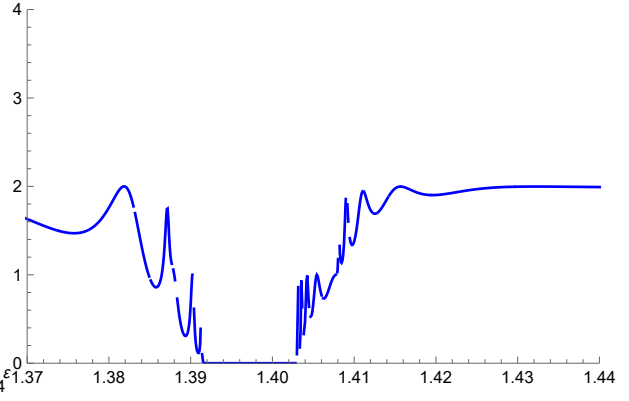


Figura 7.2: Para $U_E = 0$

Figura 7: Probabilidad de transmisión v/s energía con un campo eléctrico externo aplicado para $M = 5$, $\gamma = 1$, $N = 12$, $\Gamma = 0.1$. Zona con $\varepsilon_D = 1.48$.

En la Fig. 7 se observan los efectos de los "adatoms" alrededor del valor de energía donde $\varepsilon = 0$. Se observa que el rango de energía donde la transmisión se hace cero está desviado ligeramente hacia la izquierda. El potencial eléctrico altera estos efectos, sobre todo para $\varepsilon < \varepsilon_{U,D}$. Cuando tenemos impurezas con valores de energía muy cercanos, como en la Fig. 8, aparecen interferencias entre estos efectos provocados por los "adatoms".

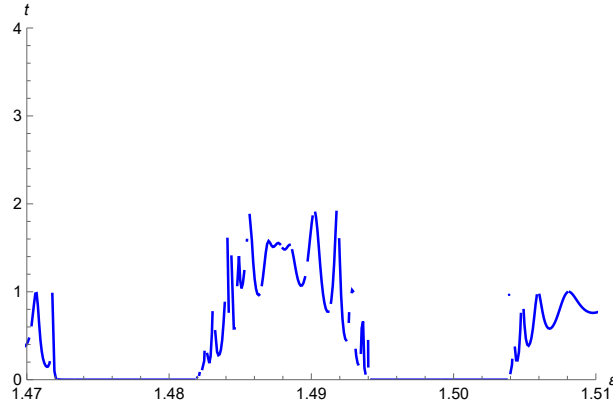


Figura 8: Probabilidad de transmisión v/s energía para $M = 5$, $\gamma = 1$, $N = 12$, $\Gamma = 0.1$. Zona con $\varepsilon_D = 1.48$, $\varepsilon_U = 1.5$ y $U_E = 0$. Las distorsiones visibles en medio son debidas a los "adatoms".

6 Conclusiones

Estudiamos las propiedades de transporte de una estructura de nanocintas de siliceno completamente dopada con impurezas ("adatoms") en la región central central del conductor. Usamos un Hamiltoniano de ligaduras fuertes para modelar el sistema. Para un sistema dopado uniformemente en la región central es posible mapear las ecuaciones de movimientos bidimensionales en cadenas efectivas diatómicas. Este desacople permite calcular analíticamente la transmisión por cada canal disponible. Estudiamos la evolución de la transmisión en función del campo eléctrico aplicado y de la energía de los "adatoms". El principal efecto de la presencia de los estos es la formación de una zona de transmisión prohibida alrededor de la energía de los "adatoms". Por otra parte el efecto del campo eléctrico perpendicular a la nanocinta reduce la transmisión entorno de la energía Fermi del sistema.

7 Anexo A: Cálculo de ecuaciones

7.1 Fase entre átomos A(B):

La solución matricial en las guías es:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon & (e^{-ik}\eta + \gamma) \\ (e^{ik}\eta + \gamma) & \varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_l \\ B_l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

De esto podemos hallar la ecuación:

$$\varepsilon A_l + (e^{-ik}\eta + \gamma) B_l = 0,$$

Y despejando B_l :

$$B_l = \frac{-\varepsilon}{\gamma(2 \cos q_m e^{-ik} + 1)} A_l,$$

Finalmente la fase $e^{i\theta}$ entre A_l y B_l es:

$$e^{i\theta} = \frac{-\varepsilon}{\gamma(1 + 2 \cos q_m e^{-ik})}$$

La solución matricial en el conductor central es:

$$\begin{bmatrix} (\varepsilon - \varepsilon_A) & (e^{-ik_c}\eta + \gamma) \\ (e^{ik_c}\eta + \gamma) & (\varepsilon - \varepsilon_B) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_c \\ B_c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

De esto podemos hallar la ecuación:

$$(\varepsilon - \varepsilon_A) A_c + (e^{-ik_c}\eta + \gamma) B_c = 0,$$

Y despejando B_l :

$$B_c = \frac{-(\varepsilon - \varepsilon_A)}{\gamma(2 \cos q_m e^{-ik_c} + 1)} A_c,$$

Finalmente la fase $e^{i\theta_c}$ entre A_c y B_c es:

$$R_c e^{i\theta_c} = \frac{-(\varepsilon - \varepsilon_A)}{\gamma(1 + 2 \cos q_m e^{-ik_c})},$$

$$e^{i\theta_c} = \frac{-(\varepsilon - \varepsilon_A)}{R_c \gamma(1 + 2 \cos q_m e^{-ik_c})},$$

7.2 Cálculo de las ecuaciones (14):

Para $j = 0$, considerando que es un átomo B:

$$\varepsilon \psi_0^B = -2\gamma \cos(q_m) \psi_1^A - \gamma \psi_0^A,$$

$$\varepsilon \psi_0^B + \gamma \psi_0^A = -2\gamma \cos(q_m) \psi_1^A,$$

$$\varepsilon(e^{i\theta} + r e^{-i\theta}) + \gamma(1 + r) = -2\gamma \cos(q_m)(A_c e^{ik_c} + B_c e^{-ik_c}),$$

$$\varepsilon e^{i\theta} + \gamma + r(\varepsilon e^{-i\theta} + \gamma) = -2\gamma \cos(q_m)(A_c e^{ik_c} + B_c e^{-ik_c}),$$

Sabemos que en los sitios $j \leq 0$:

$$e^{i\theta} = \frac{-\varepsilon}{\gamma(1 + 2e^{-ik} \cos(q_m))},$$

Así, podemos hacer la relación:

$$(\varepsilon e^{i\theta} + \gamma) = -2\gamma \cos(q_m) e^{ik},$$

Finalmente, obtenemos la primera ecuación:

$$e^{ik} + r e^{-ik} = A_c e^{ik_c} + B_c e^{-ik_c}, \quad (15)$$

Para $j = 1$, considerando que es un átomo A:

$$(\varepsilon - \varepsilon_A) \psi_1^A = -2\gamma \cos(q_m) \psi_0^B - \gamma \psi_1^B,$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_A)(A_c e^{ik_c} + B_c e^{-ik_c}) + \gamma(A_c R_c e^{i\theta_c} e^{ik_c} + B_c R_c e^{-i\theta_c} e^{-ik_c}) = -2\gamma \cos(q_m)(e^{i\theta} + r e^{-i\theta}),$$

$$A_c e^{ik_c}((\varepsilon - \varepsilon_A) + \gamma R_c e^{i\theta_c}) + B_c e^{-ik_c}((\varepsilon - \varepsilon_A) + \gamma R_c e^{-i\theta_c}) = -2\gamma \cos(q_m)(e^{i\theta} + r e^{-i\theta}),$$

$$A_c e^{ik_c} e^{i\theta_c}((\varepsilon - \varepsilon_A) e^{-i\theta_c} + \gamma R_c) + B_c e^{-ik_c} e^{-i\theta_c}((\varepsilon - \varepsilon_A) e^{i\theta_c} + \gamma R_c) = -2\gamma \cos(q_m)(e^{i\theta} + r e^{-i\theta}),$$

Y dada la definición para $e^{i\theta_c}$ podemos encontrar que:

$$e^{i\theta_c} = \frac{-(\varepsilon - \varepsilon_A)}{R_c \gamma (1 + 2 \cos(q_m) e^{-ik_c})},$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_A) e^{-i\theta_c} + \gamma R_c = R_c (-2\gamma \cos q_m e^{-ik_c}),$$

Finalmente reemplazamos y encontramos el resultado esperado:

$$R_c(A_c e^{i\theta_c} + B_c e^{-i\theta_c}) = e^{i\theta} + r e^{-i\theta}, \quad (16)$$

Para $j = N$, considerando que es un átomo B:

$$(\varepsilon - \varepsilon_B) \psi_N^B = -2\gamma \cos(q_m) \psi_{N+1}^A - \gamma \psi_N^A,$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_B)R_c(A_c e^{ik_c N} e^{i\theta_c} + B_c e^{-ik_c N} e^{-i\theta_c}) + \gamma(A_c e^{ik_c N} + B_c e^{-ik_c N}) = -2\gamma \cos(q_m) t e^{ik(N+1)},$$

$$R_c A_c [(\varepsilon - \varepsilon_B) e^{ik_c N} e^{i\theta_c} + \frac{\gamma e^{ik_c N}}{R_c}] + R_c B_c [(\varepsilon - \varepsilon_B) e^{-ik_c N} e^{-i\theta_c} + \frac{\gamma e^{-ik_c N}}{R_c}] = -2\gamma \cos(q_m) t e^{ik(N+1)},$$

Y dada la definición para $e^{i\theta_c}$:

$$e^{i\theta_c} = \frac{-\gamma(1 + 2\cos(q_m)e^{-ik_c})}{R_c(\varepsilon - \varepsilon_B)},$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_B)e^{i\theta_c} + \frac{\gamma}{R_c} = \frac{-2\gamma \cos q_m e^{-ik_c}}{R_c},$$

Finalmente reemplazamos y el resultado es:

$$A_c e^{-ik_c(N+1)} + B_c e^{-ik_c(N+1)} = t e^{ik(N+1)} \quad (17)$$

Para $j = N + 1$, considerando que es un átomo A:

$$\varepsilon \psi_{N+1}^A = -2\gamma \cos(q_m) \psi_N^B - \gamma \psi_{N+1}^B,$$

$$\varepsilon(t e^{ik(N+1)}) + \gamma(t e^{ik(N+1)} e^{i\theta}) = -2\gamma \cos(q_m) R_c(A_c e^{ik_c N} e^{i\theta_c} + B_c e^{-ik_c N} e^{-i\theta_c}),$$

$$t e^{ik(N+1)}(\varepsilon + \gamma e^{i\theta}) = -2\gamma \cos q_m R_c(A_c e^{ik_c N} e^{i\theta_c} + B_c e^{-ik_c N} e^{-i\theta_c}),$$

$$t e^{ik(N+1)}(\varepsilon + \gamma e^{i\theta}) = -2\gamma \cos q_m R_c(A_c e^{ik_c N} e^{i\theta_c} + B_c e^{-ik_c N} e^{-i\theta_c}),$$

Y dada la definición para $e^{i\theta}$:

$$e^{i\theta} = \frac{-\varepsilon}{\gamma(1 + 2e^{-ik} \cos q_m)},$$

$$\varepsilon + \gamma e^{i\theta} = -2\gamma e^{-ik} \cos q_m,$$

Finalmente, reemplazamos:

$$t e^{ikN} e^{i\theta} = R_c(A_c e^{ik_c N} e^{i\theta_c} + B_c e^{-ik_c N} e^{-i\theta_c}) \quad (18)$$

7.3 Cálculo manual de la transmisión:

Partiendo de las dos ecuaciones:

$$\frac{1}{R_c(e^{ik_c}e^{-i\theta_c} - e^{-ik_c}e^{i\theta_c})}te^{ikN}(R_ce^{ik}(e^{-ik_c(N-1)}e^{-i\theta_c} - e^{ik_c(N-1)}e^{i\theta_c}) + e^{i\theta}(e^{ik_cN} - e^{-ik_cN})) = e^{ik} + re^{-ik}, \quad (19)$$

$$\frac{1}{R_c(e^{ik_c}e^{-i\theta_c} - e^{-ik_c}e^{i\theta_c})}te^{ikN}(R_c^2e^{ik}(e^{-ik_cN} - e^{ik_cN}) + e^{i\theta}R_c(e^{ik_c(N+1)}e^{-i\theta_c} - e^{-ik_c(N+1)}e^{i\theta_c})) = e^{i\theta} + re^{-i\theta}, \quad (20)$$

Reenombremos los siguientes términos por simplicidad:

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{R_c(e^{ik_c}e^{-i\theta_c} - e^{-ik_c}e^{i\theta_c})}, \\ B &= (R_ce^{ik}(e^{-ik_c(N-1)}e^{-i\theta_c} - e^{ik_c(N-1)}e^{i\theta_c}) + e^{i\theta}(e^{ik_cN} - e^{-ik_cN})), \\ C &= (R_c^2e^{ik}(e^{-ik_cN} - e^{ik_cN}) + e^{i\theta}R_c(e^{ik_c(N+1)}e^{-i\theta_c} - e^{-ik_c(N+1)}e^{i\theta_c})), \end{aligned}$$

Comenzamos con la ecuación (23):

$$\begin{aligned} \frac{te^{ikN}B}{A} &= e^{ik} + re^{-ik}, \\ \frac{te^{ikN}B}{A} - e^{ik} &= re^{-ik}, \\ r &= \frac{te^{ikN}B}{Ae^{-ik}} - e^{2ik}, \\ r &= \frac{te^{ik(N+1)}B}{A} - e^{2ik} \end{aligned} \quad (21)$$

Reemplazando (25) en la ecuación (24):

$$\begin{aligned} \frac{te^{ikN}C}{A} &= e^{i\theta} + re^{-ik\theta}, \\ \frac{te^{ikN}C}{A} &= e^{i\theta} + \left(\frac{te^{ik(N+1)}B}{A} - e^{2ik}\right)e^{-i\theta}, \\ t\left(\frac{Ce^{ikN}}{A} - \frac{Be^{ik(N+1)}e^{-i\theta}}{A}\right) &= e^{i\theta} - e^{2ik}e^{-i\theta}, \\ t &= \frac{A(e^{i\theta} - e^{2ik}e^{-i\theta})}{Ce^{ikN} - Be^{ik(N+1)}e^{-i\theta}}, \end{aligned}$$

Luego reemplazamos A , B , C , simplificamos y obtenemos t:

$$t = \frac{R_c(e^{ik_c}e^{-i\theta_c} - e^{-ik_c}e^{i\theta_c})(e^{i\theta} - e^{2ik}e^{-i\theta})}{e^{ik}e^{-i\theta}(-2e^{ikN}e^{ik}R_c^2(isen(k_cN)) + R_ce^{i\theta}(isen(k_c(N+1) - \theta_c)) + R_ce^{ik}(isen(k_c(N-1) + \theta_c)) + e^{i\theta}(isen(k_cN)))}, \quad (22)$$

References

- [1] Castro Neto A H, Guinea F, Peres N M R, Novoselov K S y Geim A K, 2009, <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>
- [2] Aufray B, Kara A, Vizzini S, Oughaddou H, Landri C, Ealet B y Le Lay G, 2010, <https://doi.org/10.1063/1.3419932>
- [3] De Padova P et al, 2010, <https://doi.org/10.1063/1.3459143>
- [4] Lalmi B, Oughaddou H, Enriquez H, Kara A, Vizzini S, Ealet B y Aufray B, 2010, <http://dx.doi.org/10.1063/1.3524215>
- [5] Liu C C, FengWand y Yao Y, 2011, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.076802>
- [6] Ezawa M, 2012, <http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/14/3/033003>
- [7] Le Lay G, 2015, <http://dx.doi.org/10.1038/nnano.2015.10>
- [8] Tao L, Cinquanta E, Chiappe D, Grazianetti C, Fanciulli M, Dubey M, Molle A y Akinwande D, 2015, <http://dx.doi.org/10.1038/nnano.2014.325>
- [9] Introduction to Solid State Physics, Charles Kittel(8th edition, Wiley, 2005)
- [10] Reich S, Maultzsch J, Thomsen C y Ordejón P, 2002, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.035412>