

Análisis de estados ligados en el continuo y propiedades de transporte en un sistema Fabry-Pérot compuesto por una homoestructura de grafeno.

Proyecto de investigación para optar al grado de licenciado en física.

Autor:

Johann Diethelm

Profesores Guía:

Luis Rosales, Pedro Orellana





CONSTANCIA DE VALIDACIÓN Y CONFIDENCIALIDAD DE MONOGRAFÍA A REPOSITORIO ACADÉMICO

1.- IDENTIFICACIÓN DEL TRABAJO ACADÉMICO

Tipo de monografía (marcar una opción): Memoria o trabajo de título Tesis de Postgrado

Título del trabajo: Análisis de estados ligados en el continuo y propiedades de transporte en un sistema Fabry-Pérot compuesto por una homoestructura de grafeno

Nombre del candidato(a): Johann Sebastian Diethelm Galleguillos

Carrera / Grado: Licenciatura en Física

Campus: San Joaquín **Departamento:** Física

2.- VALIDACIÓN DEL PROFESOR GUÍA/DIRECTOR DE TESIS

Yo, Luis Rosales Ahumada, en mi calidad de profesor(a) guía/director(a) del trabajo académico mencionado anteriormente **DEJO CONSTANCIA** que:

- He revisado esta versión del documento y corresponde a la versión final aprobada del trabajo.
- El trabajo cumple con los requisitos académicos y de formato establecidos por la institución.

3.- EVALUACIÓN DE CONFIDENCIALIDAD POR PROPIEDAD INDUSTRIAL (marcar una opción)

El trabajo **NO contiene** información que amerite confidencialidad y puede ser publicado de inmediato en repositorio con acceso abierto.

El trabajo **CONTIENE** información con potenciales implicancias de propiedad industrial o intelectual y requiere un periodo de confidencialidad (**embargo**) por (**marcar una opción**):

6 meses 12 meses 2 años 3 años 5 años 10 años

Fundamentación de la necesidad de confidencialidad (obligatorio si se solicita embargo):

4.- FIRMAS

Profesor(a) guía o director(a) de memoria o tesis:

Fecha: 05-05-2026

Firma: _____

Estudiante o Candidato(a):

Fecha: 05-05-2026

Firma: _____

Este formulario debe ser insertado como página 2 de la memoria o tesis, completado y firmado por estudiante y profesor(a) antes de la entrega en portal PRISMA de Biblioteca USM.

Agradecimientos

A mis profesores guía, los cuales no solo me guiaron en esta investigación, sino que además forjaron las herramientas necesarias en mí para empezar mi carrera académica superior. Existe un factor sumamente importante a la hora de hacer ciencia, y como recién empieza mi carrera he visto poco y nada. Es gracias a la contextualización que me han otorgado durante este proyecto de investigación la razón de por qué me motiva querer seguir más adelante en la academia; sin esto no podría haberme dado cuenta de la obsesión emergente que tengo y tendré por esta linda disciplina.

A Erwin Díaz y Eduardo Contreras por ver en mí un potencial y motivarme a elegir este camino. Cada uno con sus formas, pero el mensaje llegó claramente y aquí estoy, a las tres de la mañana no solo hoy, sino que gran parte del tiempo que le dediqué a esta investigación. Pero ahí es donde quiero y debo estar, y por esto estoy agradecido.

A cada uno de mis amigos los cuales han estado para mí en los contextos que me hubiese encantado que hubieran sido paralelos a mi trayectoria académica. Considero que cada uno de ellos son un pilar fundamental distintivo entre sí los cuales están ahí no solo para ayudarme, sino también para ser ayudados y de última pasarlo bien en esos momentos de estrés. Este factor es comúnmente normalizado, y francamente no debería ser así. Tener un buen grupo de estudio es útil, pero que ese grupo de estudio a la vez sean personas sumamente cercanas al nivel personal, las cuales admiro por sobre muchas otras personas, es una bendición, y espero que eso nunca cambie.

Índice

1. Segunda cuantización	5
1.1. Operadores de campo	5
1.2. Escritura de operadores unipartícula en segunda cuantización	6
2. Modelo de enlace fuerte	8
2.1. Simetría traslacional en un cristal	8
2.2. Combinación lineal de orbitales atómicos (Modelo de enlace fuerte)	10
3. Funciones de Green	12
3.1. Ecuación de Dyson	12
3.2. Densidad de estados	13
3.3. Formulación de Fisher-Lee	14
4. Fenómenos de interferencia	16
4.1. Efecto Fano y estados ligados en el continuo	16
5. Flujo de trabajo numérico	18
5.1. Metodología general	18
5.2. Hamiltonianos traslacionalmente invariantes	18
5.3. Decimación de López Sancho-Rubio	19
5.4. Obtención de resultados numéricos	21
6. Grafeno	21
6.1. Modelo de enlace fuerte	22
6.2. Densidad de estados del grafeno	23
7. Nanocintas de grafeno	24
7.1. aGNRs	24
7.1.1. Elección de celda unitaria para simulaciones	25
7.1.2. Espectro energético y autofunciones de aGNRs	26
7.1.3. Propiedades de transporte de aGNRs	30
7.2. zGNR	31
7.2.1. Espectro energético y autofunciones de zGNRs	32
7.2.2. Análisis del momento transversal	34
7.2.3. Propiedades de transporte de zGNRs	37
8. Sistema bilayer	38
8.1. Terminación <i>armchair</i>	38
8.2. Resultados numéricos para aGNRs	41
8.3. Terminación <i>zigzag</i>	43
8.4. Resultados numéricos para zGNRs	45
9. Sistema Fabry-Pérot	47
9.1. Comportamiento general del sistema	47
9.2. Terminación <i>armchair</i>	51
9.3. Terminación <i>zigzag</i>	55
10. Conclusiones	58
A. Base no diagonal en k para aGNR	59
Referencias	61

1. Segunda cuantización

Consideremos un sistema cuántico descrito por un espacio de Hilbert \mathcal{H} . En este caso, podemos interpretar que cada estado $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ es una configuración posible para una partícula situada de alguna manera en el sistema descrito por este espacio de Hilbert. Esta idea de analizar sistema unipartículas se puede extender a sistemas de múltiples partículas, y esto mediante la definición de sistemas descritos por **espacios de Fock**. Sin embargo, en este trabajo no consideraremos los efectos de muchos cuerpos, pero la notación descrita por este formalismo será la base fundamental para describir los sistemas de análisis, y esto más que nada por la comodidad de escritura de hamiltonianos y fácil entendimiento de las interacciones que componen a este objeto.

1.1. Operadores de campo

La idea de esta expansión es considerar ahora un estado multipartícula:

$$|n_1, n_2 \dots n_i \dots n_N\rangle \in \bigotimes_{i=1}^N \mathcal{H}_i \quad (1.1)$$

En donde n_i es la cantidad de partículas con autovalor k_i para algún operador. De esto, obtenemos la primera definición pertinente:

Definición 1.1.1: Espacio de Fock/Ocupación

Sean $\{\mathcal{H}_i\}_{i=1}^N$ espacios de Hilbert, entonces se define el **espacio de Fock** como:

$$\mathcal{F} := \bigotimes_{i=1}^N \mathcal{H}_i$$

Desde esta definición, tenemos dos casos especiales en términos de los estados que componen a este espacio recientemente definido:

1. $|0, 0, \dots, 0\rangle := |\mathbf{0}\rangle$ (No hay partículas en ningún estado unipartícula)

- Se denomina **vacío**
- **Normalizado:** $\langle \mathbf{0} | \mathbf{0} \rangle = 1$

2. $|0, 0, \dots, n_i = 1, 0, 0 \dots\rangle := |k_i\rangle$ (Solo 1 partícula con autovalor k_i)

- Estado analizado en cuántica unipartícula, con el Hilbert \mathcal{H} previamente definido.

A partir de esto, es natural (y conveniente) definir un operador que nos permita describir la acción de **crear** una partícula con autovalor k_i , tal que:

$$\hat{c}_i^\dagger |n_1, n_2 \dots n_i \dots\rangle \propto |n_1, n_2 \dots n_i + 1 \dots\rangle \quad (1.2)$$

La lógica para establecer esta relación se basa en el hecho de que este operador **crea** una partícula con autovalor k_i en el estado a operar, tal como impusimos previamente. Esto nos lleva naturalmente a pensar que, si aplicamos este operador sobre el vacío, entonces deberíamos obtener un estado proporcional al estado unipartícula $|k_i\rangle$. Entonces, postulamos lo siguiente:

$$\hat{c}_i^\dagger |\mathbf{0}\rangle \doteq |k_i\rangle \quad (1.3)$$

Usando (1.2), (1.3) y el hecho de que tanto $|k_i\rangle$ y $|\mathbf{0}\rangle$ están normalizados, se puede mostrar que:

$$\hat{a}_i |k_i\rangle = |\mathbf{0}\rangle \quad (1.4)$$

Lo cual nos lleva a pensar que \hat{c}_i es un operador de **aniquilación**. Finalmente, podemos definir completamente este operador de campo:

Definición 1.1.2: Operador de campo, creación y aniquilación

Sea $|n_1, n_2 \dots n_i \dots\rangle \in \mathcal{F}$, entonces se define el **operador de campo/creación** como:

$$\hat{c}_i^\dagger : \mathcal{F} \rightarrow \mathcal{F} \quad , \quad |n_1, n_2 \dots n_i \dots\rangle \mapsto \hat{c}_i^\dagger |n_1, n_2 \dots n_i \dots\rangle : \propto |n_1, n_2 \dots n_i + 1 \dots\rangle$$

Y, en consecuencia, el **operador de aniquilación** como:

$$\hat{c}_i : \mathcal{F} \rightarrow \mathcal{F} \quad , \quad |n_1, n_2 \dots n_i \dots\rangle \mapsto \hat{c}_i |n_1, n_2 \dots n_i \dots\rangle : \propto |n_1, n_2 \dots n_i - 1 \dots\rangle$$

- Se tienen los siguientes postulados:

Postulados de los operadores de campo

1. $\hat{c}_i^\dagger |\mathbf{0}\rangle = |k_i\rangle$
2. $\hat{c}_i |\mathbf{0}\rangle = 0$
3. $\hat{c}_i |k_j\rangle = \delta_{ij} |\mathbf{0}\rangle$

Se define, a su vez, el **operador número**:

$$\hat{n}_i : \mathcal{F} \rightarrow \mathcal{F} \quad , \quad |n_1, n_2 \dots n_i \dots\rangle \mapsto \hat{n}_i |n_1, n_2 \dots n_i \dots\rangle := \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i |n_1, n_2 \dots n_i \dots\rangle \equiv n_i |n_1, n_2 \dots n_i \dots\rangle$$

Además, invocando el **teorema de estadística de spin** [5, 14], podemos dar con la siguiente tabla:

Propiedades de operadores de campo

Bosones	Fermiones
$[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0$	$\{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} = 0$
$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0$	$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = 0$
$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij} \hat{1}$	$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} = \delta_{ij} \hat{1}$

1.2. Escritura de operadores unipartícula en segunda cuantización

Ahora, nos gustaría construir operadores que hagan más que contar partículas, como el operador número. Para esto, supongamos un operador unipartícula aditivo $\hat{\mathcal{K}}$, tal que:

$$\hat{\mathcal{K}} = \sum_i \hat{\mathcal{K}}_i \quad , \quad \text{con } \hat{\mathcal{K}}_i |k_j\rangle = \delta_{ij} k_j |k_j\rangle \quad (1.5)$$

y un estado multipartícula $|\Psi\rangle = |n_1, n_2 \dots\rangle$, entonces podemos representar $\hat{\mathcal{K}}$ en términos de la base compuesta por los operadores número, dado que (1.5) nos dice que el estado unipartícula $|k_j\rangle$ es autoket de $\hat{\mathcal{K}}_j$, entonces, para cada suma parcial que compone $\hat{\mathcal{K}}$, debemos dejar el estado unipartícula intacto, y solo extraer el respectivo autovalor. Esto es lo que hace el operador número:

$$\hat{\mathcal{K}} = \sum_i k_i \hat{n}_i \quad (1.6)$$

No obstante, nos gustaría una expresión que use los operadores de campo como base, y para ello veamos lo siguiente. Si estuviésemos en una base distinta, para un estado en \mathcal{H} se cumple la regla de cambio de base típica:

$$\underbrace{|k_i\rangle}_{\in \mathcal{H}} = \sum_j \underbrace{|l_j\rangle}_{\in \mathcal{H}'} \langle l_j | k_i \rangle \quad (1.7)$$

Entonces, a partir de esto, podemos proponer naturalmente lo siguiente:

Proposición 1.2.1. Sean $|k_i\rangle \in \mathcal{H}$, $|l_j\rangle \in \mathcal{H}'$, $\forall i, j$, entonces:

$$\hat{a}_i^\dagger = \sum_j \hat{b}_j^\dagger \langle l_j | k_i \rangle \iff \hat{a}_i = \sum_j \hat{b}_j \langle k_i | l_j \rangle \quad (1.8)$$

Demostración: Solo queremos probar si tiene sentido. No es una demostración per se. Para esto, sabemos desde el primer postulado de los operadores de campo que $\hat{a}_i^\dagger |\mathbf{0}\rangle = |k_i\rangle$. Podemos entonces hacer el cambio de base para el operador de campo y ver si llegamos al mismo resultado:

$$\begin{aligned}\hat{a}_i^\dagger |\mathbf{0}\rangle &= \sum_j \hat{b}_j^\dagger \langle l_j | k_i \rangle |\mathbf{0}\rangle \\ &= \sum_j \underbrace{\hat{b}_j^\dagger |\mathbf{0}\rangle}_{=|l_j\rangle} \langle l_j | k_i \rangle \\ &= \sum_j |l_j\rangle \langle l_j | k_i \rangle \\ &= |k_i\rangle\end{aligned}$$

Por lo que podemos decir que la proposición tiene sentido. No es tan riguroso, pero de esta misma manera podemos probar los demás postulados y con eso ya podemos decir que el cambio de base es un homomorfismo (conserva la estructura). \square

Ya con esto, podemos computar el cambio de base para el operador número:

$$\begin{aligned}\hat{n}_i &= \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \\ &= \sum_{m,n} \hat{b}_m^\dagger \langle l_m | k_i \rangle \hat{b}_n \langle k_i | l_n \rangle \\ &= \sum_{m,n} \hat{b}_m^\dagger \hat{b}_n \langle l_m | k_i \rangle \langle k_i | l_n \rangle\end{aligned}$$

y esto reemplazarlo en (1.6):

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{K}} &= \sum_i k_i \sum_{m,n} \hat{b}_m^\dagger \hat{b}_n \langle l_m | k_i \rangle \langle k_i | l_n \rangle \\ &= \sum_{m,n} \hat{b}_m^\dagger \hat{b}_n \langle l_m | \left(\sum_i k_i |k_i\rangle \langle k_i| \right) | l_n \rangle\end{aligned}$$

Notar que $\hat{\mathcal{K}} |k_i\rangle = \sum_j \hat{\mathcal{K}}_j |k_i\rangle = \sum_j \delta_{ji} k_i |k_i\rangle = k_i |k_i\rangle$, entonces:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{K}} &= \sum_{m,n} \hat{b}_m^\dagger \hat{b}_n \langle l_m | \left(\sum_i \hat{\mathcal{K}} |k_i\rangle \langle k_i| \right) | l_n \rangle \\ &= \sum_{m,n} \hat{b}_m^\dagger \hat{b}_n \langle l_m | \underbrace{\hat{\mathcal{K}} \sum_i |k_i\rangle \langle k_i|}_{=\hat{\mathbf{1}}} | l_n \rangle\end{aligned}$$

$$\boxed{\therefore \hat{\mathcal{K}} = \sum_{m,n} \hat{b}_m^\dagger \hat{b}_n \underbrace{\langle l_m | \hat{\mathcal{K}} | l_n \rangle}_{:=K_{mn}}} \quad (1.9)$$

Por lo que ahora tenemos una regla para poder escribir cualquier operador unipartícula aditivo en el lenguaje de segunda cuantización.

2. Modelo de enlace fuerte

En primera instancia, nos gustaría construir un modelo efectivo que nos permita emular la física de algún **crystal**. Hay diversos métodos para hacerlo, pero nos fijaremos en uno en específico que es el modelo de **combinación lineal de orbitales atómicos** (LCAO), o **enlace fuerte**, en literatura más moderna. Para esto, debemos entender primero que nada cómo se constituye un cristal.

2.1. Simetría traslacional en un cristal

Un cristal se define como un arreglo periódico de partículas interactuantes, con su interacción mediada por un potencial periódico $V(\mathbf{r})$. Sea $\mathcal{B} = \{\mathbf{t}_n\}_n$ el conjunto base de vectores traslación, tal que la posición de una partícula que compone al cristal sea una combinación lineal integral de la base \mathcal{B} , es decir:

$$\mathbf{R} = \sum_i a_i \mathbf{t}_i, \quad \forall i, a_i \in \mathbb{Z} \quad (2.1)$$

Entonces, queremos describir la interacción $V(\mathbf{r})$ a partir de la **simetría traslacional** existente que define al cristal, es decir:

$$V(\mathbf{r}) \equiv V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (2.2)$$

y efectivamente describir el sistema a partir de una base descrita por una representación del grupo traslacional, *i.e.* un operador \hat{T} que commute con el hamiltoniano:

$$[\hat{H}, \hat{T}(\mathbf{R})] = 0, \quad \forall \mathbf{R} \quad (2.3)$$

Definamos $\langle \mathbf{r} | \hat{T}(\mathbf{R}) | \psi \rangle := \langle \mathbf{r} - \mathbf{R} | \psi \rangle$, dado que:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \hat{H} \hat{T}(\mathbf{R}) | \psi \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \langle \mathbf{r} | \hat{T}(\mathbf{R}) | \psi \rangle + \langle \mathbf{r} | \hat{V} \hat{T}(\mathbf{R}) | \psi \rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \langle \mathbf{r} - \mathbf{R} | \psi \rangle + V(\mathbf{r}) \langle \mathbf{r} | \hat{T}(\mathbf{R}) | \psi \rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \langle \mathbf{r} - \mathbf{R} | \psi \rangle + V(\mathbf{r}) \langle \mathbf{r} - \mathbf{R} | \psi \rangle \end{aligned}$$

y:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \hat{T}(\mathbf{R}) \hat{H} | \psi \rangle &= \langle \mathbf{r} - \mathbf{R} | \hat{H} | \psi \rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \langle \mathbf{r} - \mathbf{R} | \psi \rangle + V(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \langle \mathbf{r} - \mathbf{R} | \psi \rangle \end{aligned}$$

Con esto, vemos que para que se cumpla (2.3), se impone la simetría traslacional de (2.2), por lo que $\hat{T}(\mathbf{R})$ es una **representación** del grupo de simetría traslacional.

Ahora, para poder encontrar este operador, podemos hacer lo siguiente. Consideremos la acción infinitesimal del operador \hat{T} sobre un estado $|\psi\rangle$, proyectado en la base de posición:

$$\langle \mathbf{r} | \hat{T}(d\mathbf{R}) | \psi \rangle := \psi(\mathbf{r} - d\mathbf{R}) \quad (2.4)$$

Expandiendo en Taylor, y solo considerando el primer orden, esto por el hecho de que la traslación espacial es infinitesimal:

$$\langle \mathbf{r} | \hat{T}(d\mathbf{R}) | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r}) - d\mathbf{R} \cdot \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} + \mathcal{O}(dR^2) \quad (2.5)$$

Ahora, podemos usar el hecho de que la acción de $\hat{\mathbf{p}}$ sobre un estado $|\psi\rangle$ en la base de posición se expresa según:

$$\langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} | \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \iff \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} = \frac{i}{\hbar} \langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} | \psi \rangle \quad (2.6)$$

entonces:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r} | \hat{T}(d\mathbf{R}) | \psi \rangle &= \langle \mathbf{r} | \psi \rangle - d\mathbf{R} \cdot \frac{i}{\hbar} \langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} | \psi \rangle \\ \implies \hat{T}(d\mathbf{R}) &= \hat{\mathbb{1}} - \frac{i}{\hbar} d\mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}}\end{aligned}$$

Ahora, para armar una traslación no infinitesimal, podemos decir lo siguiente:

$$\begin{aligned}\hat{T}(\mathbf{R}) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\hat{T} \left(\frac{\mathbf{R}}{N} \right) \right)^N \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{i\mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{N\hbar} \right)^N \\ \implies \hat{T}(\mathbf{R}) &\equiv e^{-i\mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}}/\hbar}\end{aligned}\tag{2.7}$$

Ahora, dado que se cumple la relación de conmutación (2.3), podemos encontrar los autoestados de $\hat{T}(\mathbf{R})$ para así escribir los autoestados del sistema. Notemos que, si imponemos que $|\psi\rangle$ sea un autoket de $\hat{T}(\mathbf{R})$, entonces:

$$\langle \mathbf{r} | \hat{T}(\mathbf{R}) | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \mathbf{r} | e^{-i\mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}}/\hbar} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \mathbf{r} | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\tag{2.8}$$

pero a su vez:

$$\langle \mathbf{r} | \hat{T}(\mathbf{R}) | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} - \mathbf{R})\tag{2.9}$$

entonces, igualando (2.8) y (2.9):

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\tag{2.10}$$

Con esto, podemos forzar la construcción de una función periódica en \mathbf{R} . Esta es la llamada **función de Bloch**:

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) := e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\tag{2.11}$$

Proposición 2.1.1. $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ es periódica en \mathbf{R}

Demostración: Veamos que:

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R})} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})\tag{2.12}$$

Pero por (2.10), podemos hacer el cambio $\mathbf{R} \rightarrow -\mathbf{R}$, y decir:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\tag{2.13}$$

Entonces:

$$\begin{aligned}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R})} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\end{aligned}$$

$$\therefore u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\tag{2.14}$$

□

Y con esto, podemos enunciar el **Teorema de Bloch**:

Teorema 2.1.1: Teorema de Bloch

Sea $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ la **red directa** generada por la base $\mathcal{B} = \{\mathbf{t}_n\}_n$, y $\Lambda^* \subset \mathbb{R}^d$ su **red recíproca**, definida por:

$$\Lambda^* := \{\mathbf{G} \in \mathbb{R}^d \mid \mathbf{G} \cdot \mathbf{R} \in 2\pi\mathbb{Z}, \forall \mathbf{R} \in \Lambda\}$$

Definimos el **toro real** $\mathbb{T}^d := \mathbb{R}^d/\Lambda$ y el **toro de Brillouin** $\text{BZ} := \mathbb{R}^d/\Lambda^*$. Ahora, consideremos el operador de Schrödinger $\hat{H} : L^2(\mathbb{R}^d) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d)$, tal que:

$$\langle \mathbf{r} \mid \hat{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \langle \mathbf{r} \mid$$

con:

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r}), \quad \forall \mathbf{R} \in \Lambda$$

tal que $[\hat{H}, \hat{T}(\mathbf{R})] = 0$ para todo $\mathbf{R} \in \Lambda$. Entonces:

1. Para cada $\mathbf{k} \in \text{BZ}$, existe un **operador reducido**:

$$\hat{H}_{\mathbf{k}} : L^2(\mathbb{T}^d) \rightarrow L^2(\mathbb{T}^d) \quad , \quad u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \mapsto \langle \mathbf{r} \mid \hat{H}_{\mathbf{k}} \mid u_{\mathbf{k}} \rangle := \left(\frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla + \hbar\mathbf{k})^2 + V(\mathbf{r}) \right) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

2. Para cada $\mathbf{k} \in \text{BZ}$, la relación de dispersión de $\hat{H}_{\mathbf{k}}$ es **puramente discreto** y está formado por una sucesión creciente de autovalores:

$$E_{\mathbf{k}}^1 < E_{\mathbf{k}}^2 < \dots \rightarrow +\infty$$

3. Los autovectores del operador reducido $\hat{H}_{\mathbf{k}}$ correspondientes tienen la forma:

$$|\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |u_{n,\mathbf{k}}\rangle$$

con $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, y $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \in L^2(\mathbb{T}^d)$, lo que implica que $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \in L^2(\mathbb{R}^d)$

- El conjunto $\{\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\}_{n,\mathbf{k}}$ es una **base completa** de $L^2(\mathbb{R}^d)$

2.2. Combinación lineal de orbitales atómicos (Modelo de enlace fuerte)

Ya con esto, podemos empezar a suponer un modelo para un problema de un cristal arbitrario. Supongamos que, dado el arreglo periódico de **fermiones** que compone al cristal, el potencial que rige al sistema cumple:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R} \in \Lambda} V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \tag{2.15}$$

en donde $V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ es un potencial tipo pozo decadente centrado en \mathbf{R} , el cual atrapa al electrón alrededor de cada átomo, y deja un solapamiento con los pozos vecinos. Debemos mostrar ahora que $V(\mathbf{r})$ es periódico:

Proposición 2.2.1. $V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R} \in \Lambda} V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ es periódico en \mathbf{R} .

Demostración: Notemos que:

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) &= \sum_{\mathbf{R}' \in \Lambda} V_0(\mathbf{r} + \underbrace{\mathbf{R} - \mathbf{R}'}_{:= \mathbf{R}'' \in \Lambda}) \\ &= \sum_{\mathbf{R}'' \in \Lambda} V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}'') \end{aligned}$$

$$\therefore V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \equiv V(\mathbf{r})$$

□

Ahora, como tenemos un potencial periódico, por el teorema de Bloch se cumple:

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.16)$$

pero estas funciones no son localizadas, sino que son ondas planas moduladas por la periodicidad de la red. Para localizar las soluciones, definimos las **funciones de Wannier**:

Definición 2.2.1: Funciones de Wannier

Sea $\mathbf{R} \in \Lambda$, entonces la **función de Wannier** de la n -ésima banda, centrada en \mathbf{R} , se expresa según:

$$\phi_{n,\mathbf{R}}(\mathbf{r}) := \frac{1}{\sqrt{|\Lambda|}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.17)$$

- En el límite continuo $|\Lambda| \gg 1$, podemos considerar la siguiente definición:

$$\phi_{n,\mathbf{R}}(\mathbf{r}) := \frac{1}{\sqrt{|\text{BZ}|}} \int_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3k \quad (2.18)$$

Estas funciones son la forma de **representar** el estado localizado en un n -ésimo **orbital** de un átomo situado en la posición \mathbf{R} del cristal, y esto proyectado en el espacio posición. Con esto, tenemos una **base completa** del sistema de análisis, por lo que podemos decir que si consideramos \hat{H} el hamiltoniano de un sistema, entonces:

$$\hat{H} = \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}' \in \Lambda} H_{n,n';\mathbf{R},\mathbf{R}'} |\phi_{n,\mathbf{R}}\rangle \langle \phi_{n',\mathbf{R}'}| \quad (2.19)$$

en donde $H_{n,n';\mathbf{R},\mathbf{R}'} = \langle \phi_{n,\mathbf{R}} | \hat{H} | \phi_{n',\mathbf{R}'} \rangle$, y la **firma** del cristal sobre este término radica en el potencial \hat{V} , y como decimos que este potencial es lo suficientemente **fuerte** como para localizar electrones en los átomos que componen al cristal, podemos hablar acerca de **acoplamientos vecinos**. En general, podemos decir que $H_{n,n';\mathbf{R},\mathbf{R}'} = 0$ para vecinos de $l+1$ -grado en adelante, lo que nos lleva a un régimen de enlace fuerte de acoplamiento a l -vecinos más cercanos.

Con esto, reemplazando este término en (1.9), obtenemos la representación en **segunda cuantización** de un hamiltoniano de enlace fuerte con n grados de libertad intracelda:

$$\hat{H} = \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}' \in \Lambda} \hat{c}_{n,\mathbf{R}}^\dagger \hat{c}_{n',\mathbf{R}'} H_{n,n';\mathbf{R},\mathbf{R}'} \quad (2.20)$$

En donde $\hat{c}_{n,\mathbf{R}}^\dagger$ es el operador de creación de un n -ésimo fermión (bosón) en la celda situada en la posición \mathbf{R} del cristal. Por otra parte, ahora que tenemos la información del cristal en una base la cual representa la **red directa**, nos gustaría obtener una expresión dependiente de la **red recíproca**. Para ello, nos retornamos a la definición de las **funciones de Wannier**, y hacemos la transformada directa, obteniéndose:

$$|\phi_{n,\mathbf{R}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{|\Lambda|}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle \quad (2.21)$$

Podemos llegar a una expresión de la misma naturaleza para los **operadores de campo** usando el primer postulado de los operadores de campo, es decir:

$$\hat{c}_{n,\mathbf{R}}^\dagger |\mathbf{0}\rangle \doteq |\phi_{n,\mathbf{R}}\rangle \quad (2.22)$$

Reemplazando esto en (2.21), obtenemos:

$$\hat{c}_{n,\mathbf{R}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{|\Lambda|}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \hat{c}_{n,\mathbf{k}}^\dagger \quad (2.23)$$

Lo que se conoce como la **transformada de Fourier discreta** para este operador de campo. Esto lo podemos reemplazar directamente en (2.20). Al trabajar la expresión, obtenemos:

$$\hat{H} = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}' \in \Lambda} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \text{BZ}} e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}' - \mathbf{k} \cdot \mathbf{R})} H_{n,n'; \mathbf{R}, \mathbf{R}'} \hat{c}_{n, \mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{n', \mathbf{k}'} \quad (2.24)$$

Lo que nos daría la expresión para este hamiltoniano en la base de **momenta** del sistema, útil para obtener la relación de dispersión de este, o bien la **representación modal** de un sistema.

3. Funciones de Green

Una herramienta poderosa tanto a nivel analítica como de computación numérica para resolver problemas en el régimen de física cuántica son las **funciones de Green**, las cuales traducen el problema de una ecuación diferencial a encontrar el **núcleo** de esta para así obtener una forma de propagar una solución desde un punto en específico (espacio o tiempo. En este trabajo consideraremos hamiltonianos independientes del tiempo, por lo que su dependencia temporal será siempre mediante una fase) para así obtener las soluciones a lo largo del sistema completo. Esto es útil sobretodo a la hora de analizar sistemas más grandes los cuales tengan alguna simetría interna, como **simetría traslacional**, por ejemplo, dado que existen formas recursivas para computar y evaluar estas funciones de Green y así obtener las propiedades que querramos analizar. En esta sección definiremos formalmente la idea de una función de Green asociada a un operador diferencial, y luego explotaremos la forma de la ecuación de Schrödinger para obtener una forma recursiva para estas funciones. Esto es sumamente importante a la hora de querer analizar **propiedades de transporte**, como veremos en los ejemplos de las siguientes secciones.

3.1. Ecuación de Dyson

Consideremos la ecuación de Schrödinger para un autoestado $|\psi\rangle$ del sistema descrito por \hat{H} :

$$(E\hat{1} - \hat{H})|\psi\rangle = 0 \quad (3.1)$$

Por la definición de las funciones de Green, sabemos que esta se define como el **núcleo** de la ecuación diferencial aplicada sobre el estado $|\psi\rangle$, por lo que se tiene que:

$$\hat{G} := (E\hat{1} - \hat{H})^{-1} \quad (3.2)$$

Ahora, si consideramos nuestro sistema descrito por la acción de un hamiltoniano local \hat{H}_0 y un potencial perturbativo \hat{V} , tal que el efecto de este potencial sobre el sistema local sea mucho menor que el efecto dado por la propia estructura de este, entonces podemos reescribir nuestro hamiltoniano del sistema de la siguiente manera:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (3.3)$$

La gracia de esto es que ahora podemos **elegir** nuestro \hat{H}_0 tal que la función de Green asociada a este operador diferencial sea obtenible de manera analítica, y luego usar teoría de perturbaciones independientes del tiempo para incluir la acción de \hat{V} de manera aproximada. A continuación, reemplazamos la separación que imponemos para \hat{H} en (3.2):

$$\hat{G} = (E\hat{1} - \hat{H}_0 - \hat{V})^{-1} \quad (3.4)$$

Dado que \hat{V} es un operador perturbativo, entendemos que si encontramos una solución al problema **homogéneo**:

$$(E\hat{1} - \hat{H}_0)|\phi\rangle = 0 \quad (3.5)$$

entonces este potencial aporta con una corrección al estado homogéneo en cuestión para así obtener el estado total $|\psi\rangle$. Bajo esta consideración, podemos definir entonces la función de Green asociada al operador diferencial \hat{H}_0 de la siguiente forma:

$$\hat{g} := (E\hat{1} - \hat{H}_0)^{-1} \quad (3.6)$$

y esto lo podemos reemplazar en (3.4), obteniendo:

$$\hat{G} = \hat{g} + \hat{g}\hat{V}\hat{G} \quad (3.7)$$

lo cual es una forma recursiva para obtener la función de Green total \hat{G} del sistema. Esta forma es la **ecuación de Dyson**, y su uso es sumamente útil a la hora de considerar sistemas discretos, dado que podemos explotar las simetrías existentes de una forma directa para así obtener soluciones analíticas de ciertos sistemas. Lo siguiente que desarrollaremos serán las bases de lo que se conoce como **transporte electrónico**, en donde usaremos este formalismo para derivar la **densidad de estados**; útil para ver la localización/extensión de estados a lo largo de una región de energías, y la **transmitancia**; probabilidad de que exista tunelamiento cuántico en un sistema.

3.2. Densidad de estados

Nos gustaría ahora desarrollar una herramienta que nos sirva para visualizar los estados de un sistema de alguna manera. Para ello, podemos pensar en la siguiente representación:

$$\text{DOS}(E) := \sum_{\mathbf{R}} \delta(E - E_{\mathbf{R}}) \quad (3.8)$$

Esto nos dice que los estados con energías $E_{\mathbf{R}}$ son **polos** de esta función, y justamente por esta razón es que podemos usar esto para entender sistemas en la aproximación de enlace fuerte. Ahora bien, debemos buscar una forma de **medir** esta cantidad. En este caso, podemos llegar de manera sencilla a partir del formalismo de **funciones de Green**.

Sean \mathcal{H} un espacio de Hilbert, y $\mathcal{B} := \{|\psi_{\mathbf{R}}\rangle\}_{\mathbf{R}} \leq \mathcal{H}$ una **base** para \mathcal{H} , y además consideremos una función de Green para el sistema tal que se cumpla la ecuación de Dyson. Esta ecuación la podemos reescribir de la siguiente manera:

$$\hat{G}^r(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_{\mathbf{R}} \frac{|\psi_{\mathbf{R}}\rangle\langle\psi_{\mathbf{R}}|}{E + i\eta - E_{\mathbf{R}}} \quad (3.9)$$

En donde hemos explotado el hecho de que \mathcal{B} es una **base** para \mathcal{H} , y consideramos $\eta > 0$ infinitesimal como *detour* para los polos en $E = E_{\mathbf{R}}$. Esta expresión se denomina **representación de Lehmann** para la función de Green, y en particular es una manera de poder evaluar estas funciones si es que tenemos el conjunto de autofunciones \mathcal{B} . Ahora bien, si tomamos la **traza** de este operador, obtenemos:

$$\text{Tr}(\hat{G}^r(E)) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_{\mathbf{R}} \frac{1}{E + i\eta - E_{\mathbf{R}}} = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_{\mathbf{R}} \frac{E - E_{\mathbf{R}} - i\eta}{(E - E_{\mathbf{R}})^2 + \eta^2} \quad (3.10)$$

Usando la construcción de la función Lorentziana normalizada:

$$L(E) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{(E - E_0)^2 + \gamma^2} \quad (3.11)$$

y sabiendo que en el límite $\gamma \rightarrow 0^+$ este perfil tiende a una función tipo delta en energía centrada en E_0 , entonces reemplazando esto en lo anterior y considerando únicamente la parte imaginaria, se obtiene directamente:

$$\Im \left[\text{Tr}(\hat{G}^r(E)) \right] = -\pi \sum_{\mathbf{R}} \delta(E - E_{\mathbf{R}}) \quad (3.12)$$

Finalmente, reemplazando la definición de densidad de estados de (3.8) tenemos:

$$\text{DOS}(E) = -\frac{1}{\pi} \Im \left[\text{Tr}(\hat{G}^r(E)) \right] \quad (3.13)$$

Y esta expresión nos será útil a la hora de realizar cálculos numéricos, dado que la función de Green la podemos determinar de otras formas, tal como veremos en la siguiente sección, pero luego de obtenerla, tenemos una forma de visualizar el sistema mediante la **densidad de estados**, independiente de la forma en que se obtenga este operador.

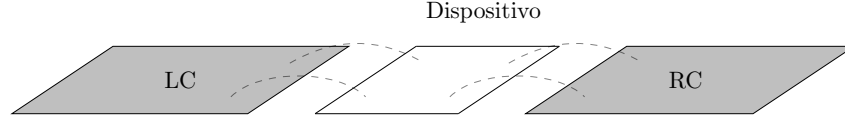


Figura 1: Esquema de la configuración de contacto-dispositivo a analizar

3.3. Formulación de Fisher-Lee

Uno de los sistemas más clásicos en el área de transporte electrónico es el estudio de las propiedades de **scattering** a través de un material. Justamente la forma en la que analizaremos los sistemas más adelante será mediante esta formulación la cual se compone de dos partes. En este caso consideraremos un **dispositivo**; el cual emulará la zona de scattering para los electrones para así analizar las propiedades de transporte a través de este material, y **contactos**; lo que se puede entender como cristales semiinfinitos los cuales se acoplan al dispositivo. La gracia de que se consideren cristales semiinfinitos es que los electrones que circulen desde un contacto, a través del dispositivo, hasta otro contacto, tendrán un **continuo** de energías por las cuales pueden incidir al material. Esto es sumamente útil para poder analizar efectos de atrapamiento electrónico y efectos de interferencia cuántica, tal como veremos en los sistemas de análisis de este trabajo.

Existen una diversidad de configuraciones posibles para la conexión de los contactos, y cada una de ellas ha demostrado tener efectos importantes dependiendo del sistema. En particular, nos centraremos en la configuración dada por el esquema de la Figura 1, en donde (L/R)C son el **contacto** izquierdo y derecho, respectivamente. Bajo esta consideración del sistema, podemos escribir el hamiltoniano total del sistema de la siguiente manera:

$$[\hat{H}] \equiv \begin{pmatrix} \hat{H}_{LC} & \hat{V}_{LD} & \hat{0} \\ \hat{V}_{LD}^\dagger & \hat{H}_D & \hat{V}_{RD}^\dagger \\ \hat{0} & \hat{V}_{RD} & \hat{H}_{RC} \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

En donde $\hat{H}_{(L/R)C}$ es el hamiltoniano local para el contacto izquierdo (derecho), $\hat{V}_{(L/R)D}$ el potencial de acoplamiento entre el contacto respectivo y el dispositivo y \hat{H}_D el hamiltoniano local del dispositivo. Desde esto, podemos emplear la definición de la función de Green total del sistema según (3.2) y determinar:

$$\begin{cases} \hat{G}_{LD} = \hat{g}_{LC} \hat{V}_{LD} \hat{G}_D \\ \hat{G}_D = \hat{g}_D + \hat{g}_D \hat{V}_{LD}^\dagger \hat{G}_{LD} + \hat{g}_D \hat{V}_{RD}^\dagger \hat{G}_{RD} \\ \hat{G}_{RD} = \hat{g}_{RC} \hat{V}_{RD} \hat{G}_D \end{cases} \quad (3.15)$$

Luego, encontramos una forma cerrada para la función de Green total del **dispositivo**:

$$\hat{G}_D = \hat{g}_D + \hat{g}_D \hat{\Sigma}_L \hat{G}_D + \hat{g}_D \hat{\Sigma}_R \hat{G}_D \quad (3.16)$$

En donde definimos las **autoenergías** $\hat{\Sigma}_{(L/R)} := \hat{V}_{(L/R)D}^\dagger \hat{g}_{(L/R)C} \hat{V}_{(L/R)D}$. Un aspecto importante de esta expresión es que, si retornamos a la **ecuación de Dyson** presente en (3.7), podemos considerar un sistema efectivo el cual se compone de un hamiltoniano local \hat{H}'_D y un potencial perturbativo \hat{V} , en donde si hacemos ahora la comparación de ambos términos, concluimos con:

$$\hat{H}'_D = \hat{H}_D + (\hat{\Sigma}_L + \hat{\Sigma}_R) \quad (3.17)$$

Esta expresión es útil dado que no tenemos que preocuparnos por la injerencia del continuo en el sistema, dado que este queda codificado en este nuevo potencial dependiente de las autoenergías de los contactos. Sin embargo, el precio a pagar es que este potencial efectivo que estamos considerando suele ser **no-hermítico**, lo cual podemos interpretar como pérdidas/ganancias en el dispositivo. Esto tiene total sentido dado que los contactos funcionan como reservorios que interactúan entre sí mediante el dispositivo como sumidero de partículas, por lo que, desde el punto de vista del dispositivo, existen pérdidas/ganancias debido a esta interacción.

Ahora, nos gustaría obtener la información acerca de la **corriente** a través del dispositivo. Para ello, podemos usar la expresión para la **corriente de probabilidad** desde el contacto izquierdo hasta el derecho:

$$J_{L \rightarrow R} = -\frac{ie}{\hbar} \left[\langle \psi_{RC} | \hat{V}_{RD} | \psi_D \rangle - \langle \psi_D | \hat{V}_{RD}^\dagger | \psi_{RC} \rangle \right] \quad (3.18)$$

Y si imponemos la ecuación de Schrödinger componente a componente:

$$\begin{pmatrix} E\hat{1} - \hat{H}_{LC} & -\hat{V}_{LD} & \hat{0} \\ -\hat{V}_{LD}^\dagger & E\hat{1} - \hat{H}_D & -\hat{V}_{RD}^\dagger \\ \hat{0} & -\hat{V}_{RD} & E\hat{1} - \hat{H}_{RC} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\psi_{LC}\rangle \\ |\psi_D\rangle \\ |\psi_{RC}\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |0\rangle \\ |0\rangle \\ |0\rangle \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

Podemos obtener:

$$\begin{cases} |\psi_{LC}\rangle = \hat{g}_{LC} \hat{V}_{LD} |\psi_D\rangle \\ |\psi_D\rangle = \hat{G}_D \hat{V}_{LD}^\dagger |\psi_{LC}\rangle + \hat{G}_D \hat{V}_{RD}^\dagger |\psi_{RC}\rangle \\ |\psi_{RC}\rangle = \hat{g}_{RC} \hat{V}_{RD} |\psi_D\rangle \end{cases} \quad (3.20)$$

Lo cual lo podemos reemplazar en (3.18), obteniendo:

$$J_{L \rightarrow R} = \frac{e}{\hbar} \langle \psi_{LC} | \hat{V}_{LC} \hat{G}_D^\dagger \hat{\Gamma}_R \hat{G}_D \hat{V}_{LC}^\dagger | \psi_{LC} \rangle \quad (3.21)$$

en donde definimos $\hat{\Gamma}_{(L/R)} := -i(\hat{\Sigma}_{(L/R)} - \hat{\Sigma}_{(L/R)}^\dagger)$. Finalmente, si observamos la definición de la **corriente**:

$$I_{(L/R)} = 2 \int f(E, \mu_{(R/L)}) J_{L \rightarrow R} dE \quad (3.22)$$

En donde $f(E, \mu)$ es la función de distribución, la cual en este caso la consideramos en su forma **fermiónica**, según la forma de la distribución de Fermi-Dirac:

$$f(E, \mu) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right)} \quad (3.23)$$

Y reemplazamos lo que obtuvimos para la corriente de probabilidad, podemos obtener la **corriente total** del sistema:

$$I = I_L + I_R = \frac{2e}{\hbar} \int (f(E, \mu_L) - f(E, \mu_R)) \text{Tr}(\hat{G}_D^r \hat{\Gamma}_L \hat{G}_D^a \hat{\Gamma}_R) dE \quad (3.24)$$

Ahora bien, este trabajo considera todos los sistemas a analizar a temperatura $T = 0$, por lo que la función de distribución queda:

$$f(E, \mu) = \Theta(\mu - E) \quad (3.25)$$

Entonces, podemos reescribir la corriente, quedando:

$$I = \int_{\mu_L}^{\mu_R} \frac{2e}{\hbar} \text{Tr}(\hat{G}_D^r \hat{\Gamma}_L \hat{G}_D^a \hat{\Gamma}_R) dE \quad (3.26)$$

En donde hemos definido exitosamente la **transmitancia de Fisher-Lee**:

$$T(E) := \text{Tr}(\hat{G}_D^r \hat{\Gamma}_L \hat{G}_D^a \hat{\Gamma}_R) \quad (3.27)$$

La cual se relaciona con la **conductancia** del sistema según:

$$G(E) = G_0 T(E) \quad (3.28)$$

En donde $G_0 = 2e/h$ es un **cuanto de conductancia**. Esto nos dice que si conocemos la función de Green del sistema y las autoenergías, entonces podemos computar la conductancia del sistema mediante el formalismo de Fisher-Lee.

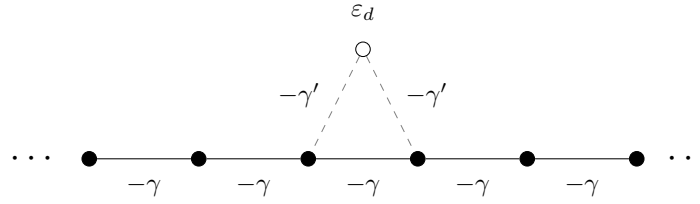


Figura 2: Cadena lineal monoatómica con una impureza lateral.

4. Fenómenos de interferencia

Ahora que tenemos la noción de lo que consiste el **transporte electrónico**, podemos empezar a indagar en ciertos fenómenos que pueden ocurrir. Esto, con la finalidad de comprender el sistema a cabalidad, mediante una traducción directa de efectos microscópicos hacia fenómenos mesoscópicos. En particular, analizaremos dos de estos, los cuales son el **efecto Fano** y los **estados ligados en el continuo** (BICs). Estos fenómenos tienen una utilidad práctica tanto a la hora de analizar sistemas los cuales presentes alguno de estos, o bien a la hora de explotarlos para la ingeniería de estructuras las cuales interfieran de forma controlada algún otro sistema. A continuación, veremos la caracterización de estos fenómenos mencionados.

4.1. Efecto Fano y estados ligados en el continuo

La forma más directa de analizar fenómenos de interferencia es considerar la perturbación a un sistema continuo. En la física cuántica fundamental, uno analiza el comportamiento de una partícula *libre*, la cual es perturbada por un sistema el cual se modela con cierto potencial acotado en el espacio predefinido de manera independiente, y desde esto se concluye que la forma en la cual se manifiesta esta interacción es mediante un cambio en la fase de los estados de esta partícula, y en particular, existe la probabilidad de tunelamiento resonante. La idea ahora es analizar cómo es el perfil de esta probabilidad de transmisión, lo que nos daría a su vez la fase resultante del estado, o bien la **transmitancia** del sistema, la cual es útil para calcular propiedades de transporte como la conductancia, como vimos previamente.

El modelo que proponemos se basa en la configuración presente en la Figura 2, la cual sería una cadena monoatómica lineal con energías de sitio ϵ_d y acoplamiento intersitio $-\gamma$ a primeros vecinos. Esta es perturbada por una impureza lateral con energía de sitio ϵ'_d con un acoplamiento $-\gamma'$. Este sistema es la forma minimal en el que podemos analizar efectos de interferencia, dado que en términos de transporte, la partícula dispersada tendrá dos caminos por los cuales puede transitar, siendo el pasar por la impureza o prescindir de ella directamente. Esto lo interpretamos como estados los cuales son resonantes con esta estructura, lo que produce tunelamiento resonante, o bien antirresonante, lo que implica atrapamiento cuántico en este recorrido.

Observando el esquema presente en la Figura 2, podemos describir la cadena inferior mediante el siguiente hamiltoniano:

$$\hat{H} = -\gamma \sum_{j \in \mathbb{Z}} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{j+1} + \text{h.c.} \quad (4.1)$$

Con esto en mente, podemos encontrar la relación de dispersión de esta cadena rápidamente imponiendo la transformada de Fourier discreta para \hat{c}_j , obteniéndose:

$$E_k = -2\gamma \cos(k) \quad , \quad k \in \text{BZ} \equiv [-\pi, \pi) \quad (4.2)$$

Esta relación de dispersión dicta los valores de energía para cualquier estado perteneciente al continuo dado por esta cadena monoatómica infinita. Si ahora suponemos que la impureza se acopla a los sitio $j = 0$ y $j = 1$ de la cadena monoatómica inferior, podemos imponer el siguiente ansatz para la función de onda:

$$|\psi_j\rangle = \begin{cases} \sum_{k \in \text{BZ}} (e^{ikj} + r_k e^{-ikj}) |k\rangle, & j < 0 \\ \sum_{k \in \text{BZ}} t_k e^{ikj} |k\rangle, & j > 1 \end{cases} \quad (4.3)$$

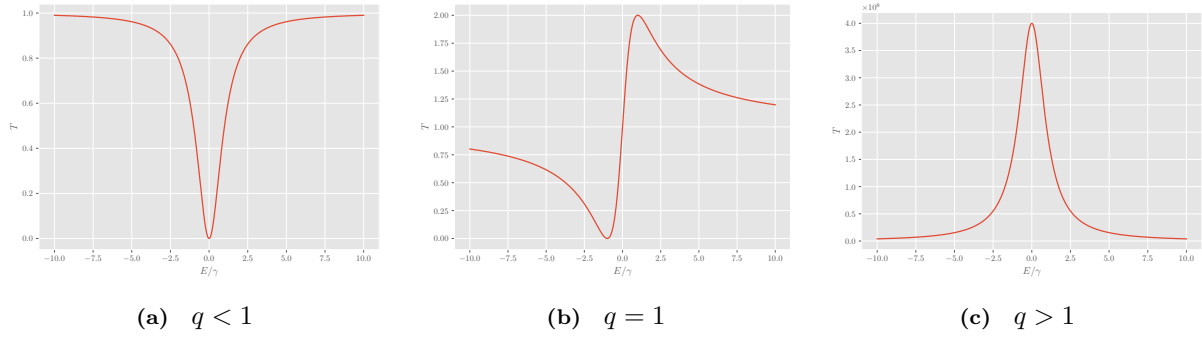


Figura 3: Perfiles de transmitancia tipo Fano para distintos regímenes de q , considerando $\gamma' = \gamma$ y $\varepsilon_d = -\gamma$

Y con esto, imponer la ecuación de Schrödinger en el espacio de momento k para distintas celdas. Esto nos da como resultado lo siguiente:

$$T(\varepsilon) \equiv |t(\varepsilon)|^2 = \frac{(\varepsilon + q)^2}{\varepsilon^2 + 1} \quad (4.4)$$

En donde definimos:

$$\begin{cases} \varepsilon := \frac{E - E_r}{\Gamma^2} \\ E_r := \varepsilon_d + \frac{\gamma'^2}{\gamma} \\ \Gamma := 2 \frac{\gamma'^2}{\gamma} \frac{2\gamma - E_r}{\sqrt{4\gamma^2 - E_r^2}} \\ q := \frac{2\gamma'^2}{\gamma\Gamma} \end{cases} \quad (4.5)$$

A este tipo de perfil se le denomina **perfil Fano**, y los parámetros definidos tienen una interpretación directa considerando la idea de que la partícula que se disperse a través del sistema verá dos caminos posibles; a través de la impureza, o directamente a través de la cadena. En particular, el parámetro ε centra el perfil en torno a una energía de resonancia E_r , la cual sería la energía efectiva de la estructura triangular que se forma considerando la vecindad de la impureza. Esta depende de un factor de ancho Γ , el cual cuantifica la tasa de escape desde dicha estructura, y su interpretación física se puede dar mediante la idea de que esta tasa es **inversamente proporcional** al tiempo de vida media de la partícula en la estructura. Por otro lado tenemos el factor de asimetría q , el cual depende de esta tasa de escape del sistema, y al ser no-nula en este caso, corrobora el hecho de que existen múltiples caminos para la partícula, y cada uno de ellos se caracteriza por una fase presente en el estado, las cuales difieren entre sí, provocando **fenómenos de interferencia**, tal como se intuía.

La forma de interpretar un sistema que tenga estos fenómenos de interferencia a partir de este perfil es mediante el factor de asimetría q , el cual en este modelo se relaciona con la tasa de escape Γ . En particular, existen 3 regímenes distintos dependiendo del factor de asimetría, según lo que se muestra en la Figura 3. Primeramente, tenemos el caso $q \in [0, 1)$, en donde se muestra un *dip* en transmitancia para $E = E_r$, lo que se traduce en una interferencia destructiva total entre ambos canales dispersivos en esta energía. Luego, tenemos el caso perfectamente asimétrico con $q = 1$, lo que se interpreta de la siguiente manera. Si consideramos una energía $E < E_r$, entonces este perfil indica que a medida nos aproximamos a esta energía efectiva E_r , los canales interfieren destructivamente. Caso contrario para cuando $E > E_r$, en donde al aproximarnos a esta energía efectiva, existe interferencia constructiva. Por último, tenemos el régimen $q > 1$, en donde se ve un perfil tipo Breit-Wigner; una resonancia en torno a esta energía efectiva, lo que indica que alrededor de esta existe tunelamiento resonante.

Estos son los perfiles convencionales que podremos encontrar a la hora de realizar simulaciones numéricas de sistemas que no consideren efectos de muchos cuerpos, y justamente este será el puente de interpretación para las estructuras que analizaremos en este trabajo. Sin embargo, existe un régimen aparte de los

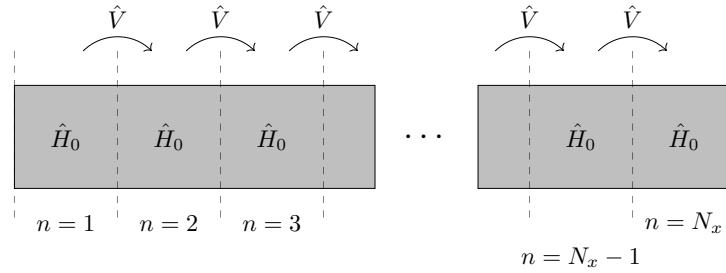


Figura 4: Esquema de un sistema translacionalmente invariante. El orden del hamiltoniano local \hat{H}_0 dicta la cantidad de grados de libertad intracelda que se tienen.

previamente explicados, y es el caso en donde $q \rightarrow \infty$, lo que es equivalente a considerar $\Gamma \rightarrow 0$. Es decir, una configuración en donde existen estados los cuales **no** irradian en absoluto, por lo que su tiempo de vida tiende a infinito. A este tipo de estados se le denominan **estados ligados en el continuo**, o BICs (*bound states in the continuum*), los cuales no tienen una firma en la transmitancia, y su generación se debe en primera instancia a fenómenos de interferencia, entre otros mecanismos. Recrear este tipo de estados de manera experimental es materia de interés debido a las diversas propuestas de ingeniería que se han presentado a lo largo de los años. Sin embargo, debido a los errores experimentales a la hora de diseñar una estructura que admita este tipo de estados, estos estados tienen un tiempo de vida finito, lo que se traduce en que este estado irradia hacia el continuo, dejando de ser un BIC y pasar a tener un ancho Γ cuantificable (lo que nos lleva al régimen $q > 1$). A este tipo de estados se le denominan **cuasi-BICs**, y su mera existencia es un buen indicio para el objetivo de confinar una partícula de manera perfecta.

5. Flujo de trabajo numérico

Como establecimos previamente, en este trabajo consideraremos sistemas cuya configuración sea como en el esquema presente en la Figura 1. Las propiedades a analizar son justamente la **densidad de estados** y la **transmitancia**, ambas obtenibles con el formalismo de **funciones de Green**, como vimos en la sección anterior, por lo que debemos establecer un flujo de trabajo numérico para poder obtener resultados de una manera generalizada. En particular, trabajaremos con **python** por simplicidad, pero cabe recalcar que los algoritmos que se desarrollarán en esta sección son transversales para cualquier otro lenguaje de cálculo numérico.

5.1. Metodología general

Nuestra meta primordial es obtener la función de Green del dispositivo de análisis, y para ello existen diversas formas, algunas más eficientes que otras. Dada la exigencia numérica que se presentará debido a los sistemas que escalan según el tamaño geométrico de la red que los describe, optaremos por calcular la función de Green **minimizando** la cantidad de inversiones matriciales a realizar, por lo que directamente usaremos la definición de las funciones de Green presente en (3.2) considerando un hamiltoniano efectivo que tiene de por sí la información de los contactos, tal como se expresa en (3.17), por lo que nos reduciremos a **construir** el hamiltoniano del dispositivo y a calcular las autoenergías, para posteriormente construir la función de Green total. En las próximas subsecciones, analizaremos paso a paso cómo realizar estos cálculos numéricos y como explotar ciertas simetrías que se observan en el sistema.

5.2. Hamiltonianos translacionalmente invariantes

Queremos encontrar una forma de explotar las simetrías de un hamiltoniano translacionalmente invariante para poder construirlo numéricamente de manera generalizada. Para ello, notemos que si consideramos un sistema tal que se pueda **particionar** según como se ve en la Figura 4, entonces podemos escribir el hamiltoniano total pensando al sistema como una **cadena** de celdas unitarias las cuales tienen como hamiltoniano local el operador \hat{H}_0 , y \hat{V} como acoplamiento interceldas $n \rightarrow n+1$. Luego, el hamiltoniano total lo escribimos como:

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^{N_x} \hat{H}_0 \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n + \sum_{n=1}^{N_x-1} (\hat{V} \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_{n+1} + \hat{V}^\dagger \hat{c}_{n+1}^\dagger \hat{c}_n) \quad (5.1)$$

lo que en su forma matricial, útil para construir este operador de manera numérica, queda:

$$[\hat{H}] \equiv \begin{pmatrix} \hat{H}_0 & \hat{V} & \hat{0} & \hat{0} & \dots \\ \hat{V}^\dagger & \hat{H}_0 & \hat{V} & \hat{0} & \dots \\ \hat{0} & \hat{V}^\dagger & \hat{H}_0 & \hat{V} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

lo que es un hamiltoniano tridiagonal, debido al comportamiento de cadena finita con $\dim(\hat{H}_0)$ grados de libertad intracelda. Ahora que tenemos una forma de construir el hamiltoniano de cualquier dispositivo (o parte de este), podemos desarrollar el flujo numérico para la incorporación de los contactos.

5.3. Decimación de López Sancho-Rubio

Si observamos la ecuación (3.16), la función de Green del dispositivo depende de las funciones de Green de los contactos, pero dado que estas estructuras con semiinfinitas, no podemos computar numéricamente la *inversión* del hamiltoniano de estos contactos, por lo que debemos desarrollar una herramienta que nos permita computar las **autoenergías** asociadas a estos cristales. Existen diversos métodos, pero en este trabajo usaremos el **formalismo de López Sancho-Rubio** [17] para derivar lo necesario para obtener estas autoenergías.

Primeramente, si observamos el hamiltoniano presente en (3.14), vemos que los subhamiltonianos $\hat{H}_{(L/R)C}$ tienen dimensión infinita, dada la consideración de que estas estructuras son semiinfinitas de por sí, por lo que estas autoenergías implican la multiplicación de matrices de estos órdenes. Ahora bien, si retornamos a la Figura 1, vemos que solo conectamos las **interfases** de cada contacto con las del dispositivo, respectivamente, por lo que el potencial $\hat{V}_{(L/R)D}$ lo podemos **redefinir** para que afecte los términos **superficiales** de cada estructura, y con esto lo que logramos es tener una multiplicación entre matrices de orden **finito**. Sin embargo, al redefinir este potencial de esta manera, nos tenemos que asegurar de encontrar la función de Green de cada contacto ligada a la superficie de este. En particular, tenemos un contacto en donde su espacio de Hilbert se puede subdividir de la siguiente manera:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_{\text{intra}} \quad (5.3)$$

En donde \mathcal{H}_x es el subespacio de Hilbert asociado a las **celdas unitarias** que construyen el cristal traslacionalmente simétrico y $\mathcal{H}_{\text{intra}}$ el subespacio de Hilbert que compone el comportamiento intracelda mediante el **span** de todos los grados de libertad dentro de estas. Con esto en mente, trabajaremos en el subespacio \mathcal{H}_x , y definiremos la base $\mathcal{B}_x := \{|\Psi_n\rangle\}_{n=0}^\infty$, entonces la **función de Green superficial** se define como:

$$\hat{g}_C := \langle 0|_x \hat{G} |0\rangle_x \quad (5.4)$$

En donde empleamos la notación $|\cdot\rangle_x$ para denotar un vector asociado a \mathcal{H}_x . Hay que tener el cuidado de que \hat{g}_C sigue siendo un operador, pero ahora sobre el subespacio de Hilbert $\mathcal{H}_{\text{intra}}$, dado que hemos **trazado** sobre el otro subespacio. Luego, podemos expresar exitosamente las autoenergías usando estos nuevos operadores:

$$\hat{\Sigma}_{(L/R)} := \hat{V}_{(L/R)D}^\dagger \hat{g}_{(L/R)C} \hat{V}_{(L/R)D} \quad (5.5)$$

Por lo que ahora bastará con construir los potenciales de acoplamiento manualmente y computar esta función de Green superficial. Aquí es donde entra en juego el formalismo de López Sancho-Rubio.

Consideremos que tenemos un contacto semiinfinito traslacionalmente simétrico tal que se pueda escribir en su aproximación de enlace fuerte a primeros vecinos de la siguiente manera:

$$\hat{H}_C = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{H}_0 \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n + \hat{V} \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_{n+1} + \hat{V}^\dagger \hat{c}_{n+1}^\dagger \hat{c}_n \quad (5.6)$$

En este caso, está implícita la denominación de la celda unitaria, esta siendo la subestructura descrita por \hat{H}_0 , y \hat{V} el potencial que describe la interacción entre celdas unitarias vecinas. Si ahora imponemos la ecuación de Dyson desde (3.7), podemos llegar al siguiente set de ecuaciones:

$$\begin{cases} (E\hat{\mathbf{1}} - \hat{H}_0)\hat{G}_{00} = \hat{\mathbf{1}} + \hat{V}\hat{G}_{10} \\ (E\hat{\mathbf{1}} - \hat{H}_0)\hat{G}_{10} = \hat{V}^\dagger\hat{G}_{00} + \hat{V}\hat{G}_{20} \\ \vdots \\ (E\hat{\mathbf{1}} - \hat{H}_0)\hat{G}_{n0} = \hat{V}^\dagger\hat{G}_{n-1,0} + \hat{V}\hat{G}_{n+1,0} \end{cases} \quad (5.7)$$

En donde $\hat{G}_{nm} := \langle n|x\hat{G}|m\rangle_x$. Si despejamos la n -ésima ecuación, obtenemos lo siguiente:

$$\hat{G}_{n0}(E) = \hat{g}_0\hat{V}^\dagger\hat{G}_{n-1,0} + \hat{g}_0\hat{V}\hat{G}_{n+1,0} \quad (5.8)$$

con $\hat{g}_0 := (E\hat{\mathbf{1}} - \hat{H}_0)^{-1}$. Notemos que si ahora consideramos $n = 1$, obtenemos:

$$\hat{G}_{10}(E) = \hat{g}_0\hat{V}^\dagger\hat{G}_{00} + \hat{g}_0\hat{V}\hat{G}_{20} \quad (5.9)$$

Si reemplazamos esto en la primera ecuación de (5.7), obtenemos:

$$(E\hat{\mathbf{1}} - \hat{\varepsilon}_{1s})\hat{G}_{00} = \hat{\mathbf{1}} + \hat{V}\hat{g}_0\hat{V}\hat{G}_{20} \quad (5.10)$$

En donde $\hat{\varepsilon}_{1s} := \hat{H}_0 + \hat{V}\hat{g}_0\hat{V}^\dagger$. Analizando esta ecuación, vemos que ahora se relaciona \hat{G}_{00} con \hat{G}_{20} . En este caso, la omisión de la dependencia entre \hat{G}_{00} y \hat{G}_{10} proviene de condensar la información de sitios en sus vecinos, logrando un sistema efectivo entre vecinos más lejanos, con componentes de Green que varían en función de las iteraciones que vamos incluyendo. Ahora, si consideramos la última ecuación de (5.7) y despejamos los términos $\hat{G}_{n-1,0}$ y $\hat{G}_{n+1,0}$ y los reemplazamos en (5.8), obtenemos:

$$(E\hat{\mathbf{1}} - \hat{\varepsilon}_1)\hat{G}_{n0} = \hat{\beta}_1\hat{G}_{n-2,0} + \hat{\alpha}_1\hat{G}_{n+2,0} \quad (5.11)$$

con:

$$\begin{cases} \hat{\alpha}_1 := \hat{V}\hat{g}_0\hat{V} \\ \hat{\beta}_1 := \hat{V}^\dagger\hat{g}_0\hat{V}^\dagger \\ \hat{\varepsilon}_1 := \hat{\varepsilon}_{1s} + \hat{V}^\dagger\hat{g}_0\hat{V} \end{cases} \quad (5.12)$$

La idea es que con esto podemos considerar el mapa $n \mapsto 2n$, y con esto llegamos a:

$$\begin{cases} (E - \hat{\varepsilon}_{1s})\hat{G}_{00} = \hat{\mathbf{1}} + \hat{\alpha}_1\hat{G}_{20} \\ (E - \hat{\varepsilon}_1)\hat{G}_{2n,0} = \hat{\beta}_1\hat{G}_{2(n-1),0} + \hat{\alpha}_1\hat{G}_{2(n+1),0} \end{cases} \quad (5.13)$$

lo que describe un **isomorfismo** para el sistema original hacia una cadena con la constante de red modificada según $a \mapsto 2a$. Es decir, es una cadena el **doblo** de larga, debido al acoplamiento entre celdas pares únicamente. Esta transformación constituye una **iteración** del método de López Sancho-Rubio. Si hacemos esto k veces, llegamos al siguiente sistema efectivo:

$$\begin{cases} (E - \hat{\varepsilon}_{ks})\hat{G}_{00} = \hat{\mathbf{1}} + \hat{\alpha}_k\hat{G}_{2^k,0} \\ (E - \hat{\varepsilon}_k)\hat{G}_{2^k n,0} = \hat{\beta}_k\hat{G}_{2^k(n-1),0} + \hat{\alpha}_k\hat{G}_{2^k(n+1),0} \end{cases} \quad (5.14)$$

con:

$$\begin{cases} \hat{\alpha}_k := \hat{\alpha}_{k-1}(E\hat{\mathbf{1}} - \hat{\varepsilon}_{k-1})^{-1}\hat{\alpha}_{k-1} \\ \hat{\beta}_k := \hat{\beta}_{k-1}(E\hat{\mathbf{1}} - \hat{\varepsilon}_{k-1})^{-1}\hat{\beta}_{k-1} \\ \hat{\varepsilon}_k = \hat{\varepsilon}_{k-1} + \hat{\alpha}_{k-1}(E\hat{\mathbf{1}} - \hat{\varepsilon}_{k-1})^{-1}\hat{\beta}_{k-1} + \hat{\beta}_{k-1}(E\hat{\mathbf{1}} - \hat{\varepsilon}_{k-1})^{-1}\hat{\alpha}_{k-1} \\ \hat{\varepsilon}_{ks} = \varepsilon_{k-1,s} + \hat{\alpha}_{k-1}(E\hat{\mathbf{1}} - \hat{\varepsilon}_{k-1})^{-1}\hat{\beta}_{k-1} \end{cases} \quad (5.15)$$

Luego, podemos realizar ν iteraciones hasta que los términos $\hat{\alpha}_\nu$ y $\hat{\beta}_\nu$ sean lo suficientemente pequeños para decir que:

$$\hat{G}_{00} \approx (E\hat{\mathbf{1}} - \hat{\varepsilon}_{\nu,s})^{-1} \quad (5.16)$$

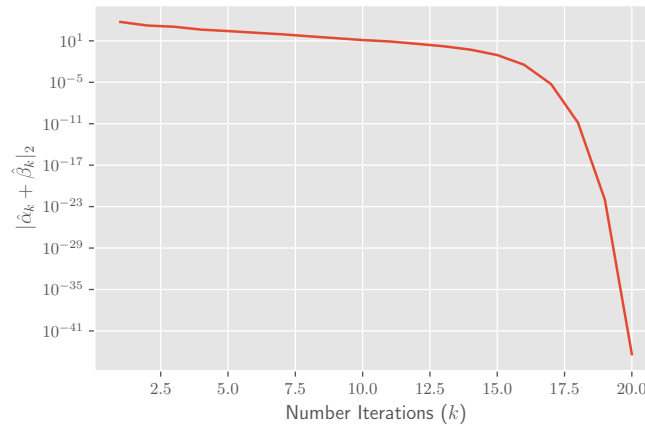


Figura 5: Error del método de López Sancho-Rubio para una nanocinta armchair de ancho transversal $N_y = 5$ y una grilla de energías con 1×10^3 puntos. La tolerancia se fija en $\text{tol} = 1 \times 10^{-35}$

Lo que corresponde a una aproximación efectiva para la función de Green superficial del contacto. Finalmente, debemos aclarar cuál es el criterio para controlar la precisión de este método. En particular, consideramos una expresión para el **error** del método tal que:

$$\|\hat{\alpha}_\nu + \hat{\beta}_\nu\|_2 \leq \text{tol} \quad (5.17)$$

Y con esto se ha demostrado que los sistemas de análisis convergen **siempre** a la función de Green superficial en aproximadamente 20 iteraciones. Este número es meramente representativo, dado que dependerá fuertemente de la cantidad de puntos de energía a considerar para la grilla, y el tamaño geométrico de la celda unitaria, pero en simulaciones diversas, la media ronda aproximadamente en esas cantidades, tal como se ve en la Figura 5.

5.4. Obtención de resultados numéricos

Ahora que tenemos las funciones de Green superficiales de los contactos, el hamiltoniano del dispositivo construido y los potenciales de acoplamiento contacto-dispositivo computados manualmente, podemos calcular la función de Green total del sistema directamente mediante (3.16), en conjunto con la **densidad de estados** (3.13) y la **transmitancia** (3.27).

A modo de comentario, esta metodología es sólida dado que es general para cualquier sistema que cumpla con algún tipo de simetría traslacional, pero es sumamente sensible al tamaño de la celda unitaria. Si la celda unitaria del sistema es grande, el método suele ser menos eficiente, por lo que en esos casos se tendría que emplear una forma distinta de conseguir estos resultados numéricos. Existen diversos intentos para lograr esto, como por ejemplo el método de Green recursivo [10], entre otros.

6. Grafeno

El grafeno es una monocapa bidimensional de átomos de carbono dispuestos en una red hexagonal tipo honeycomb. Aunque este material fue aislado experimentalmente recién en 2004 mediante exfoliación mecánica del grafito, su estructura electrónica había sido estudiada teóricamente mucho antes en el contexto del grafito. En particular, Wallace (1947) derivó la estructura de bandas para una red hexagonal de carbono usando un modelo de enlace fuerte, mostrando características que hoy se asocian directamente al grafeno, como la aparición de puntos de Dirac en la zona de Brillouin. Durante décadas se pensó que los cristales estrictamente bidimensionales no podían existir de manera estable; sin embargo, el aislamiento del grafeno demostró lo contrario y abrió un nuevo campo de investigación en materiales bidimensionales. El grafeno posee propiedades electrónicas, mecánicas y térmicas excepcionales, entre ellas alta movilidad electrónica y un comportamiento efectivo de fermiones de Dirac cerca de los puntos de contacto entre bandas. Debido a estas propiedades, el grafeno ha sido propuesto para múltiples aplicaciones en nanoelectrónica y dispositivos cuánticos. Posteriormente, surgió un gran interés en estructuras derivadas como las **nanocintas de grafeno** (GNRs), que corresponden a tiras cuasi-unidimensionales de grafeno con ancho finito. En estos sistemas, el confinamiento transversal y la geometría de los bordes (armchair

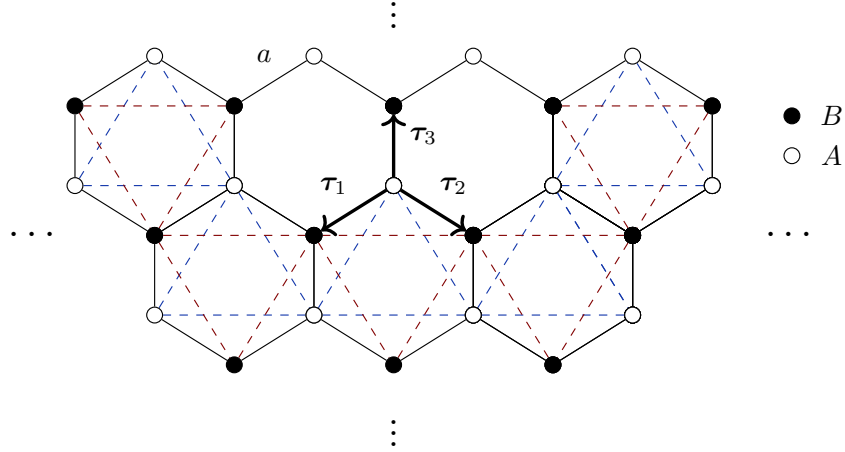


Figura 6: Esquema del grafeno en su aproximación de enlace fuerte a primeros vecinos. Los acoplamientos respectivos están demarcados en líneas sólidas, y las líneas punteadas de colores son las subredes triangulares dentro de las cuales pertenecen átomos de la propia subred. En este caso, definimos los vectores $\tau_1 = a(-\sqrt{3}/2, -1/2)$, $\tau_2 = a(\sqrt{3}/2, -1/2)$ y $\tau_3 = (0, a)$

o zigzag) modifican significativamente la estructura de bandas, pudiendo inducir la apertura de un gap o la aparición de estados localizados de borde, lo que resulta fundamental para posibles aplicaciones electrónicas.

6.1. Modelo de enlace fuerte

Consideramos un modelo tipo panel de abeja, el cual se compone de dos subredes, A y B , las cuales forman dos subredes **triangulares** solapadas entre sí, formando la estructura presente en la Figura 6. Desde esto, podemos formular el hamiltoniano de enlace fuerte a primeros vecinos:

$$\hat{H} = -\gamma \sum_{\langle \mathbf{R}_a, \mathbf{R}_b \rangle} \hat{a}_{\mathbf{R}_a}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{R}_b} \quad (6.1)$$

En donde γ es la **intensidad de acoplamiento** a primeros vecinos en este modelo de enlace fuerte para el grafeno, $\langle \cdot, \cdot \rangle$ la notación que usaremos para referirnos a **primeros vecinos** y h.c. el **hermítico conjugado** del término de la suma. Veamos que podemos pensar en todas las interacciones presentes en el hamiltoniano de la siguiente manera. Si nos situamos en cada uno de los orbitales tipo A , los orbitales vecinos siempre estarán a una distancia τ_i desde la posición \mathbf{R}_a , entonces dada la simetría traslacional del problema, podemos decir:

$$\hat{H} = -\gamma \sum_{\mathbf{R}_a} \sum_{i=1}^3 \hat{a}_{\mathbf{R}_a}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{R}_a + \tau_i} + \text{h.c.} \quad (6.2)$$

Con esto, imponemos la **transformada de Fourier discreta** presente en (2.23), obteniéndose:

$$\hat{H} = -\gamma \sum_{\mathbf{R}_a} \sum_{i=1}^3 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{1}{|\Lambda|} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_a + \tau_i)} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_a} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} + \text{h.c.} \quad (6.3)$$

Usando la propiedad de ortonormalidad $\sum_{\mathbf{R}_a} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_a} = |\Lambda| \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$, llegamos a:

$$\hat{H} = -\gamma \sum_{\mathbf{k}} \sum_{i=1}^3 e^{i\mathbf{k} \cdot \tau_i} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} + \text{h.c.} \quad (6.4)$$

Considerando el vector de operadores de campo $\hat{\Psi}_{\mathbf{k}} := (\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}})^T$, la forma matricial de este hamiltoniano en la base de momenta \mathbf{k} queda:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\Psi}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{h}_{\mathbf{k}} \hat{\Psi}_{\mathbf{k}} \quad (6.5)$$

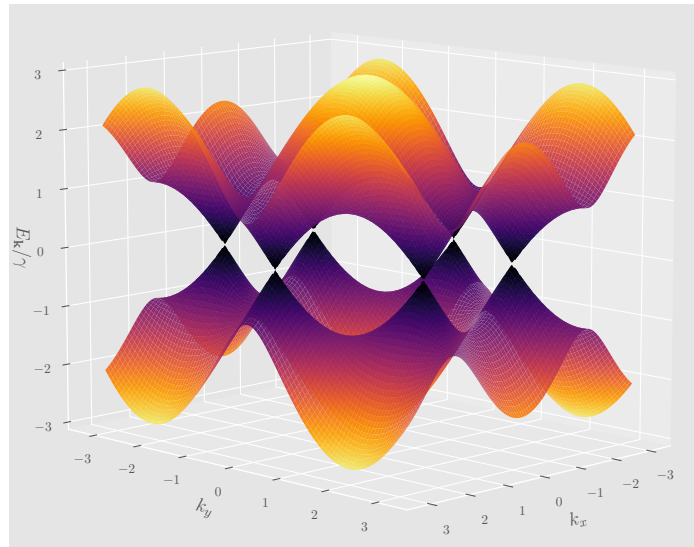


Figura 7: Relación de dispersión $E_{\mathbf{k}}$ para grafeno en su aproximación de enlace fuerte a primeros vecinos, considerando $a = 1$.

con:

$$\hat{h}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} 0 & -\gamma \sum_{i=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\tau}_i} \\ -\gamma \sum_{i=1}^3 e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\tau}_i} & 0 \end{pmatrix} \quad (6.6)$$

Al diagonalizar esta matriz, obtendremos una nueva base con la cual obtendremos la **relación de dispersión** de este sistema:

$$E_{\mathbf{k}} = \pm\gamma \sqrt{\sum_{i,j} e^{i\mathbf{k}\cdot(\boldsymbol{\tau}_i - \boldsymbol{\tau}_j)}} = \pm\gamma \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}ak_x) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x\right) \cos\left(\frac{3}{2}ak_y\right)} \quad (6.7)$$

la cual está presente en la Figura 7. En este caso, existen ciertos puntos de interés en donde el gap se cierra. Estos puntos son los llamados **puntos de Dirac** $\mathbf{K}^{\pm} = \left(\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}, \pm\frac{2\pi}{3a}\right)$. En este caso, basta con escribir dos puntos inequivalentes para describir los seis puntos aparentes en la relación de dispersión debido a la **simetría traslacional** del sistema. En particular, elegimos esta base compuesta de \mathbf{K}^{\pm} , dado que podemos generar los puntos restantes sumando vectores recíprocos $\mathbf{G} \in \Lambda^*$.

6.2. Densidad de estados del grafeno

Para computar la densidad de estados de este material, podemos emplear la expresión presente en (3.13), considerando la representación de Lehmann en el espacio de momenta, que en este caso es continuo:

$$\hat{G}^r(E) = \int_{\text{BZ}} \frac{|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|}{E - E_{\mathbf{k}} + i\eta} d^2\mathbf{k} \quad (6.8)$$

De lo cual se obtiene una expresión para la densidad de estados:

$$\text{DOS}(E) = \frac{1}{\pi} \int_{\text{BZ}} \frac{\eta}{(E - E_{\mathbf{k}})^2 + \eta^2} d^2\mathbf{k} \quad (6.9)$$

Observando la Figura 8, podemos notar la distribución de estados con respecto a la energía de dispersión que tenga la partícula. Dado el acotamiento en $[-3\gamma, 3\gamma]$ que impone el material por el límite de sus bandas, analizamos esta región energética y observamos que en la aproximación de material prístino en todas las direcciones no hay acumulación de estados con energía igual a la energía de Fermi.

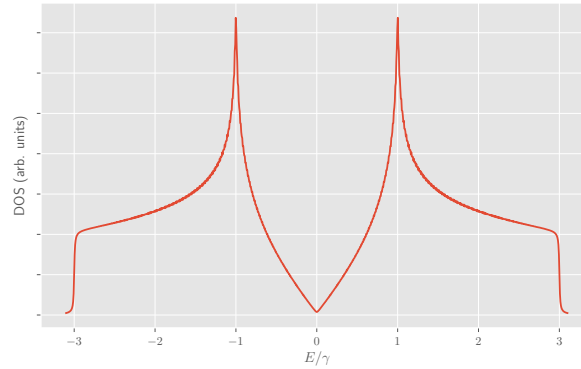


Figura 8: Densidad de estados para el grafeno, considerando $a = 1$

Sin embargo, en los puntos $E = \pm\gamma$ existe una singularidad tipo **Van Hove**, lo que se interpreta como estados que tienden a ser estacionarios, por los pliegues entre las bandas presentes en esta energía. Veamos que la densidad de estados se puede pensar como el largo de las curvas de energía constante pesada por la velocidad de dispersión:

$$\text{DOS}(E) \sim \int_{E_{\mathbf{k}}=E} \frac{dl}{\|\nabla_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}\|} \quad (6.10)$$

Por lo que estos estados se generan una vez la velocidad de dispersión $\nabla_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}$ tiende a anularse, lo que se interpreta como estados cada vez más **localizados**. Estos puntos $\mathbf{k} \in \text{BZ}$ que optimizan el gradiente de energía se le denominan puntos **M**, los que formalmente serían **puntos silla** para la relación de dispersión. La relación de dispersión en torno a estos puntos tiene el siguiente aspecto:

$$E_{\mathbf{k}=\mathbf{M}} \approx \gamma + \alpha k_x^2 + \beta k_y^2 \quad (6.11)$$

y esto implica que en torno a estos puntos, la densidad de estados tenga un comportamiento logarítmico:

$$\text{DOS}(E \approx E_{\mathbf{k}=\mathbf{M}}) \sim \log |E - \gamma| \quad (6.12)$$

Lo que explica el perfil pronunciado en estos puntos en la densidad de estados. Por último, notamos que el sistema tiene simetría partícula-hueco, esto debido a que no consideramos energías de sitio en el material, y por ende, todo el análisis que uno puede hacer para un material a energías positivas será equivalente en energías negativas. La interpretación de esto es justamente que, al no considerar energías de sitio, las partículas tendrán exactamente la misma energía que su antipartícula (en el contexto de redes electrónicas, su respectivo hueco), y por ende el análisis es el mismo debido a la equivalencia en naturaleza para estos cuerpos en el material.

7. Nanocintas de grafeno

Las **nanocintas de grafeno** (GNRs) son estructuras **infinitas** en una dirección y finitas en otra, y dependiendo los tipos de borde que se tengan, las propiedades de la estructura resultante varían. En general, existen diversos tipos de borde estudiados previamente en la literatura, pero centraremos nuestra atención en dos muy particulares y distintos entre sí. Consideramos nanocintas de grafeno con bordes tipo **armchair** (aGNR) o con bordes tipo **zigzag** (zGNR)

7.1. aGNRs

Dada la libertad que tenemos para escoger la celda unitaria que describe el sistema, podemos indagar en diversas opciones para distintos propósitos. En general, uno considera una celda unitaria tal que el sistema de análisis tenga alguna **simetría traslacional** global (o local) tal que la escritura de las soluciones se simplifique. En este caso, analizaremos las soluciones analíticas para el **autosistema** del problema, en conjunto con las propiedades de transporte de este y por último veremos una forma distinta de pensar el problema tal que nos de las herramientas para analizar **homoestructuras** construidas con este tipo de nanocintas.

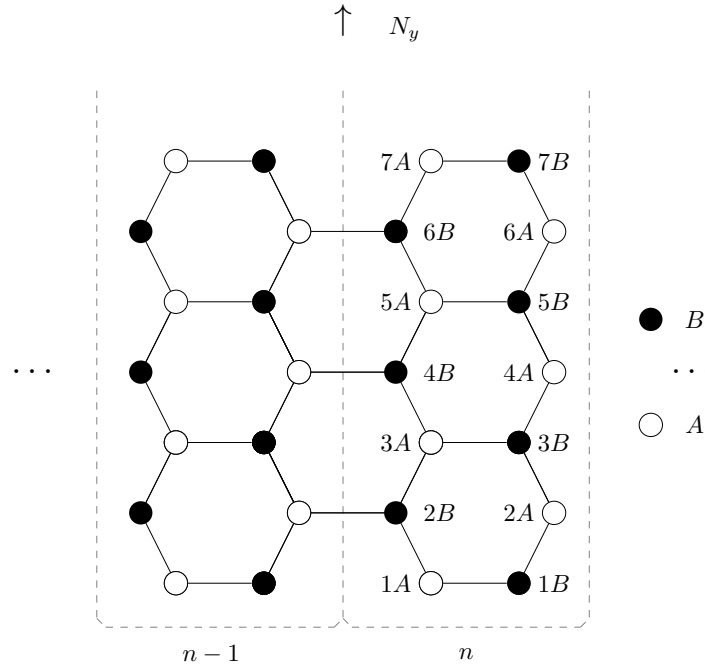


Figura 9: Esquema de indexación de aGNRs a utilizar para simulaciones

7.1.1. Elección de celda unitaria para simulaciones

La elección de **celda unitaria** típica que uno encuentra en la literatura se basa en el principio de querer encontrar una estructura que se repita a lo largo del sistema. En este caso, si nos referimos a la Figura 9, vemos que podemos pensar la nanocinta como un conjunto de columnas hexagonales conectadas entre sí. Para ser más precisos, el espacio de Hilbert del sistema lo separamos de la siguiente manera:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{intra}} \otimes \mathcal{H}_{\text{inter}} \quad (7.1)$$

En donde $\mathcal{H}_{\text{intra}}$ denota el subespacio de Hilbert de todas las celdas unitarias encerradas en la Figura 9, y $\mathcal{H}_{\text{inter}}$ todos los acoplamientos entre estos subespacios. Bajo esta lógica, consideramos:

$$\hat{H} = \sum_{n \in \mathbb{R}} \hat{H}_0 \otimes \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n + \hat{V} \otimes \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_{n+1} + \hat{V}^\dagger \otimes \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_{n-1} \quad (7.2)$$

en donde \hat{H}_0 es el hamiltoniano de la n -ésima celda unitaria, \hat{V} es el acoplamiento entre las celdas unitarias n y $n+1$ y \hat{c}_n^\dagger es el operador de creación para una celda unitaria en el índice de sitio n a lo largo del sistema. Los operadores intracelda e intercelda se definen como:

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{H}_0 = -\gamma \left[\sum_{m \text{ odd}}^{N_y} \hat{a}_m^\dagger \hat{b}_m + \text{h.c.} + \sum_{m=1}^{N_y} \hat{a}_m^\dagger \hat{b}_{m+1} + \hat{b}_m^\dagger \hat{a}_{m+1} + \text{h.c.} \right] \\ \hat{V} = -\gamma \sum_{m \text{ even}}^{N_y} \hat{a}_m^\dagger \hat{b}_m \end{array} \right. \quad (7.3)$$

Notar que con esta convención, naturalmente definimos:

$$\hat{\sigma}_m \otimes \hat{c}_n := \hat{\sigma}_{nm} \quad (7.4)$$

con $\sigma = a, b$. Debido a que tenemos **simetría traslacional** en términos de la periodicidad de la aparición de la misma celda unitaria, podemos tomar (7.2) y realizar la transformada de Fourier discreta para los operadores de campo relacionados a las celdas unitarias por completo, tratándolas como sitios con grados de libertad dentro de estos:

$$\hat{c}_n = \frac{1}{|\Lambda_x|} \sum_{q \in \text{BZ}} e^{iqn} \hat{c}_q \quad (7.5)$$

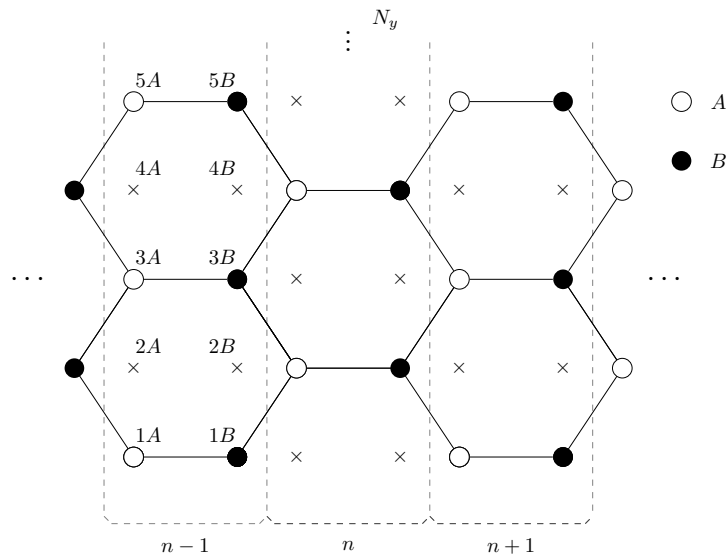


Figura 10: Esquema de indexación para un aGNR. Los átomos sólidos siguen la convención de colores predispueta en la leyenda del esquema, y los átomos representados por un \times son átomos fantasmas

En donde hay que tener cuidado ya que al condensar la información de la celda unitaria completa sobre un solo operador de campo, estamos reduciendo de 2 grados de libertad a solo 1, y esto provoca un **doblamiento** en la zona de Brillouin. Para compensar esto, basta con considerar la **mitad** de esta BZ. Al reemplazar esto en (7.2), obtenemos:

$$\hat{H} = \sum_{q \in \text{BZ}} \underbrace{(\hat{H}_0 + e^{iq/2} \hat{V} + e^{-iq/2} \hat{V}^\dagger)}_{=:\hat{H}_q} \otimes \hat{c}_q^\dagger \hat{c}_q \quad (7.6)$$

De lo cual interpretamos que este sistema es **diagonal** en la base de momento longitudinal, lo cual es esperable, dado que el sistema cumple con la simetría traslacional en este límite de nanocinta pristina. Ahora, para obtener la relación de dispersión, basta con **diagonalizar** el suboperador \hat{H}_q para encontrar la dependencia con el momento transversal. Podemos intentar argumentar que se puede hacer un trabajo similar para el momento en la dirección transversal, pero refiriéndose al Apéndice A podremos notar que este operador **no** es diagonal en esta dirección, por lo que no es una forma conveniente para obtener el autosistema de esta configuración. Para ello, debemos recurrir a una elección **distinta** para la celda unitaria. Sin embargo, esta expresión diagonal en q basta para poder observar el comportamiento de este sistema, y en general, homoestructuras que no rompan la estructura transversal de esta configuración de nanocinta pristina. Por esta razón, esta elección de celda unitaria nos conviene a la hora de simular sistemas de este tipo.

7.1.2. Espectro energético y autofunciones de aGNRs

La elección de celda unitaria usada convencionalmente para obtener resultados analíticos se presenta en la Figura 11. Con esto, consideramos el siguiente hamiltoniano:

$$\hat{H} = -\gamma \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sum_{m=1}^{N_y} \hat{a}_{nm}^\dagger \left(\hat{b}_{nm} + \hat{b}_{n-1, m-1} + \hat{b}_{n-1, m+1} \right) + \text{h.c.} \quad (7.7)$$

y las **condiciones de borde abiertas** (OBCs) están dadas por el hecho de que solo existen sitios en donde n, m comparten paridad. Para escribir de forma cerrada esta idea, definimos $r \in D_n \subset \mathbb{N}$ y analizamos caso a caso. Si n es **par**, entonces $m = 2r$. En caso contrario, si n es **impar**, entonces $m = 2r - 1$. Sin embargo, debemos encontrar la forma de este subconjunto D_n . Para ello, retornamos a la Figura 10 y proponemos:

$$D_n := \begin{cases} \left[1, \frac{N_y}{2}\right] \cap \mathbb{N}, & N_y \text{ par}, \forall n \\ \left[1, \frac{N_y+1}{2}\right] \cap \mathbb{N}, & N_y \text{ impar y } n \text{ impar} \\ \left[1, \frac{N_y-1}{2}\right] \cap \mathbb{N}, & N_y \text{ impar y } n \text{ par} \end{cases} \quad (7.8)$$

Ahora debemos imponer las OBCs. Para ello, consideramos el siguiente spinor:

$$|\Psi\rangle = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sum_{m=1}^{N_y} (\psi_{nm}^a \hat{a}_{nm}^\dagger + \psi_{nm}^b \hat{b}_{nm}^\dagger) |\mathbf{0}\rangle \quad (7.9)$$

y parametrizamos m según:

$$m \mapsto m_{r,n} := 2r - p_n \quad (7.10)$$

definiendo:

$$p_n := \begin{cases} 1, & n \text{ impar} \\ 0, & n \text{ par} \end{cases} \quad (7.11)$$

Con esto, podemos reescribir el spinor $|\Psi\rangle$ obviando los átomos fantasma interiores, por lo que las OBCs se reducen **únicamente** a las de los extremos:

$$\psi_{n,1-p_n}^\sigma = \psi_{n,N_y+p_n}^\sigma = 0 \quad (7.12)$$

con $\sigma = A, B$. Para encontrar los valores permitidos de k debido a las OBCs, proponemos el siguiente *ansatz*:

$$\psi_{nm}^\sigma := A_n^\sigma e^{ikm} + B_n^\sigma e^{-ikm} \quad (7.13)$$

y con esto, las OBCs quedan de la forma:

$$\begin{cases} A_n^\sigma e^{ik(1-p_n)} + B_n^\sigma e^{-ik(1-p_n)} = 0 \\ A_n^\sigma e^{ik(N_y+p_n)} + B_n^\sigma e^{-ik(N_y+p_n)} = 0 \end{cases} \quad (7.14)$$

Desde la primera ecuación, vemos que:

$$B_n^\sigma = -A_n^\sigma e^{2ik(1-p_n)} \quad (7.15)$$

y reemplazando en la segunda ecuación, llegamos a la condición:

$$e^{2ik(N_y+2p_n-1)} = 1 \implies k = \frac{\pi s}{N_y + 2p_n - 1}, \quad s \in \mathbb{Z} \quad (7.16)$$

Y esto tiene sentido dado que esta cuantización denota el comportamiento tipo cadena finita en la dirección transversal de la cinta, tal como se reporta en la literatura, solo que ahora, debido a elegir nuestra celda unitaria como se ve en la Figura 10, esta siendo la **mitad** de la celda unitaria convencional, entonces existe una dependencia en la **paridad** del *cell index* de esta.

Ahora que tenemos la forma de estos k , podemos imponer cómodamente la transformada derivada del *ansatz* previo para los operadores de campo $\hat{\sigma}_{nm}$, y con esto el hamiltoniano del sistema queda:

$$\hat{H} = - \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sum_{k \in \text{BZ}} \hat{a}_{nk}^\dagger (\gamma \hat{b}_{nk} + \eta_k \hat{b}_{n-1,k}) + \text{h.c.} \quad (7.17)$$

en donde se define el acoplamiento $\eta_k := 2\gamma \cos(k)$. Dado que este hamiltoniano es **diagonal** en la base de momento transversal, la **estructura modal** es una cadena SSH, tal como se ve en el esquema presente en la Figura 11. Y esto es sumamente potente a la hora de analizar homoeestructuras que **no** rompen esta estructura de momento transversal, dado que podemos realizar este mapeo y analizar el comportamiento

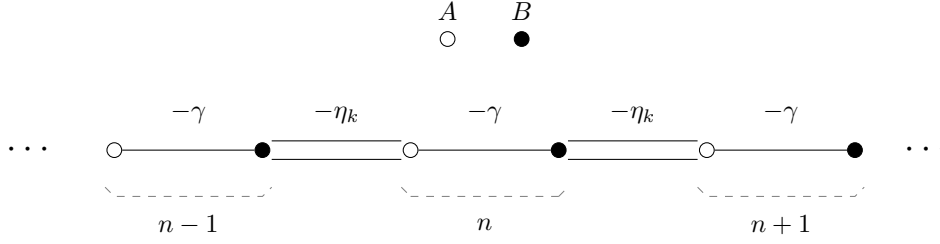


Figura 11: Estructura modal de un aGNR. En este caso, es idéntica a la estructura de una cadena SSH

de cada canal de dichos sistemas.

Ahora, para encontrar la forma del **espectro energético** del sistema, procedemos a imponer la transformada de Fourier a lo largo de la dirección longitudinal, lo que se expresaría de la siguiente manera:

$$\hat{\sigma}_{n,k} = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{q \in \text{BZ}} e^{iqX_{\sigma,n}} \hat{\sigma}_{q,k} \quad (7.18)$$

En donde debemos tener el cuidado de definir:

$$X_{\sigma,n} = \begin{cases} n, & \sigma = A \\ n + 1/2, & \sigma = B \end{cases} \quad (7.19)$$

Con esto en consideración, podemos reemplazar en el hamiltoniano total, obteniéndose:

$$\hat{H} = - \sum_{q,k \in \text{BZ}} (\gamma e^{iq/2} + \eta_k e^{-iq/2}) \hat{a}_{q,k}^\dagger \hat{b}_{q,k} + \text{h.c.} \quad (7.20)$$

Si imponemos la forma matricial de este operador, considerando la base del espacio de Fock como $\mathcal{B} = \{\hat{a}_{q,k}, \hat{b}_{q,k}\}$, entonces obtenemos:

$$\hat{H} = \sum_{q,k \in \text{BZ}} \hat{\Psi}_{q,k}^\dagger \hat{h}_{q,k} \hat{\Psi}_{q,k} \quad (7.21)$$

con:

$$\hat{h}_{q,k} \equiv \begin{pmatrix} 0 & -\gamma e^{iq/2} - \eta_k e^{-iq/2} \\ -\gamma e^{-iq/2} - \eta_k e^{iq/2} & 0 \end{pmatrix} \quad (7.22)$$

Entonces, la relación de dispersión está dada por los autovalores de esta matriz. En particular:

$$E_{q,k}^\pm = \pm \gamma \sqrt{1 + \frac{\eta_k^2}{\gamma^2} + \frac{2\eta_k}{\gamma} \cos(q/2)} \quad (7.23)$$

Lo cual muestra la existencia de dos bandas las cuales se generan por las dos subredes que conforman al sistema completo. Antes de proseguir con las autofunciones, notemos un caso interesante. Si por alguna razón tenemos una configuración tal que **pueda existir** un modo dado por $k = \pi/2$, entonces en este caso $\eta_{\pi/2} = 0$, por lo que la energía sería constante. En particular, $E_{q,k=\pi/2} = \pm \gamma$, lo que serían **bandas planas**. El caso en el cual podemos forzar la aparición de estas bandas planas ocurre únicamente si N_y es impar. Esto lo podemos demostrar observando la condición de cuantización para k en este marco:

$$k = \frac{\pi s}{N_y + 2p_n - 1}, \quad s \in \mathbb{Z} \quad (7.24)$$

Si buscamos alguna condición para que el modo singular $k = \pi/2$ exista, encontramos:

$$\frac{s}{N_y + 2p_n - 1} = 1/2 \implies 2(s - p_n) + 1 = N_y \quad (7.25)$$

Es decir, se comprueba rápidamente que N_y **debe** ser impar.

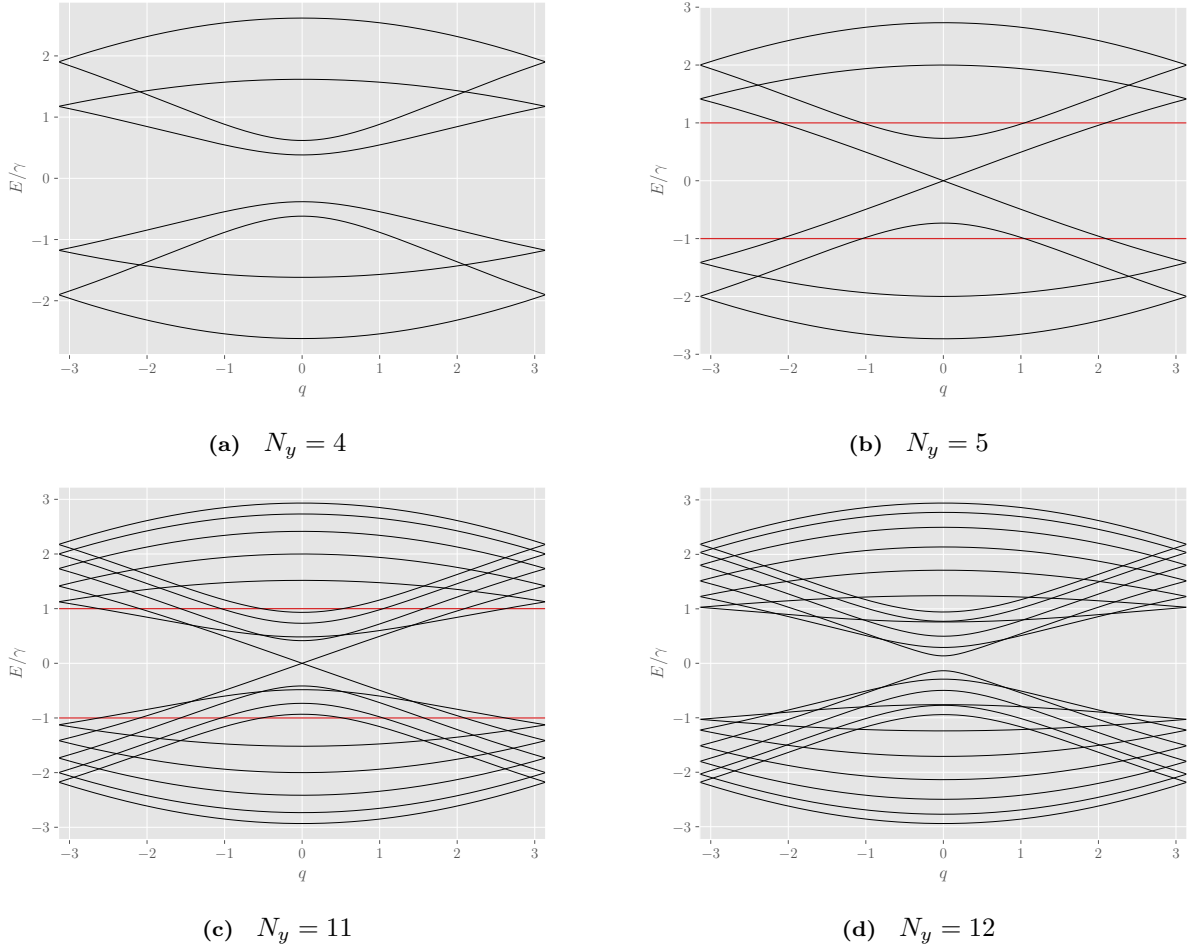


Figura 12: Relación de dispersión $E_{q,k}$ para un aGNR de diversos anchos transversales N_y . Las bandas planas (si es que existen) están rotuladas de rojo

Notamos que existen casos en los cuales el sistema es *gapless*, lo que implica que existe una **fase metálica** para este tipo de nanocintas. En particular, si analizamos el ancho del gap, computando la diferencia entre los valores de energía entre las bandas en $q = 0$, podemos dar con los siguientes valores:

$$\Delta_a = \begin{cases} 0, & N_y = 3l - 1 \\ 2\gamma \left[1 + \cos\left(\frac{3l}{3l+1}\pi\right) \right], & N_y = 3l \\ 2\gamma \left[1 + \cos\left(\frac{3l+1}{3l+2}\pi\right) \right], & N_y = 3l - 1 \end{cases} \quad (7.26)$$

con $l \in \mathbb{N}$. Esto será interesante a la hora de computar las **propiedades de transporte** de este sistema, ya que nos permite predecir que si $N_y = 3l - 1$, entonces nuestro sistema estará en una fase metálica, lo que se traduce en que el primer canal conducirá de manera perfecta, y no así para los otros casos.

Por último, analicemos las autofunciones de este sistema. En este caso, podemos usar el hamiltoniano proyectado en la base de momento y encontrar las autofunciones encontrando la forma de los autovectores de $\hat{h}_{q,k}$ de (7.22), obteniendo, tras normalizar:

$$|\Psi_{q,k}^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_{q,k}^\dagger \pm e^{-i\theta_{q,k}} \hat{b}_{q,k}^\dagger) |\mathbf{0}\rangle \quad (7.27)$$

En donde esta fase de diferencia entre subredes está dada por:

$$\phi_{q,k} = \arg(\gamma e^{iq/2} + \eta_k e^{-iq/2}) \quad (7.28)$$

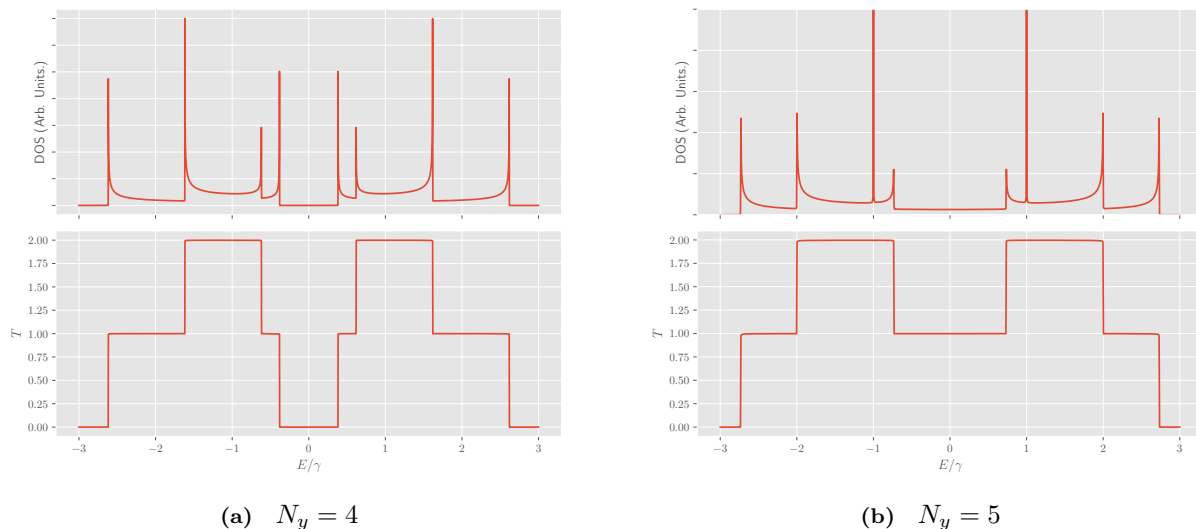


Figura 13: DOS(E) y $T(E)$ para un aGNR de diversos anchos transversales N_y respectivos

7.1.3. Propiedades de transporte de aGNRs

A continuación, analizaremos las propiedades de transporte de un aGNR. En específico, estudiaremos la **densidad de estados**, la **densidad local de estados** y la **conductancia**. Esto, con la finalidad de entender a priori las características que se tienen en un régimen balístico de transporte a lo largo de esta configuración en su forma pristina, tal como hemos estado estudiando hasta ahora.

Primeramente, veremos en detalle la **densidad de estados** y la **conductancia**. Para esto, usaremos el flujo de trabajo numérico que desarrollamos en la sección previa y llegaremos a una simulación de estas cantidades. En primera instancia, usaremos el hamiltoniano presente en (7.2), y lo particionaremos tal que tengamos un *flake* de aGNR conectado a dos contactos prístinos hechos del mismo material. Esto, con la finalidad de decimar estas regiones semiinfinitas y poder así obtener la información del continuo en la simulación. Luego de esto, seguimos el conducto regular del cálculo numérico, armando la función de Green total del dispositivo y luego computando la densidad de estados según:

$$\text{DOS}(E) = -\frac{1}{\pi} \Im [\text{Tr}(\hat{G}(E))] \quad (7.29)$$

Por otro lado, la conductancia la calcularemos usando el formalismo de Landauer-Büttiker. En particular, como consideramos nuestra configuración en temperatura 0, tenemos la relación:

$$G(E) = \frac{2(e^-)^2}{h} T(E) \quad (7.30)$$

En donde (e^-) es la carga del electrón, h la constante de Planck y $T(E)$ la **transmitancia**. De ahora en adelante, lo que simularemos será la **transmitancia**, lo que bajo este régimen se entiende como la conductancia en unidades del cuanto de esta, es decir $G_0 := 2(e^-)^2/h$. La transmitancia se calcula mediante la relación de **Fisher-Lee**:

$$T(E) = \text{Tr}[\hat{\Gamma}^L \hat{G}^r \hat{\Gamma}^R \hat{G}^a] \quad (7.31)$$

Diversas simulaciones se muestran en la Figura 13, en donde podemos ver claramente que en el caso en donde $N_y = 3l - 1$ se tiene un canal que transmite perfectamente en torno a la energía de Fermi del sistema, mientras que en otros casos este canal se destruye, lo que se condice con lo predicho previamente. Por otro lado, vemos que en el caso $N_y = 5$ tenemos peaks tipo delta en la densidad de estados en $E = \pm\gamma$, lo que se explica con el hecho de que en estas configuraciones aparece una banda plana en esta propia energía, y justamente al aparecer esta banda plana, se permiten estados los cuales tienen velocidad de grupo **nula**. Esto, dado que la velocidad de grupo a cierto momento longitudinal para un modo transversal en específico depende linealmente de $\partial_q E_{q,k}$. Entonces, al tener una velocidad de grupo nula en estas energías, interpretamos que estos estados están **localizados** en el material, y por ende **no**

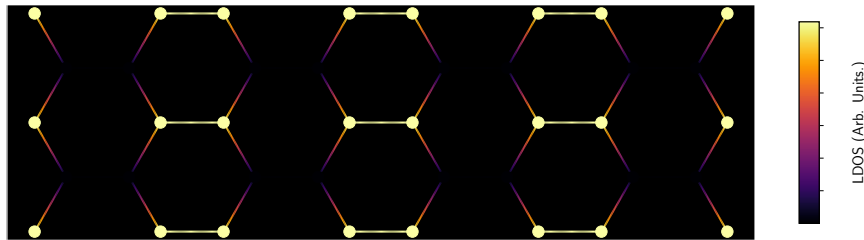


Figura 14: LDOS($E = \gamma$) para un aGNR con $N_y = 5$. Se selecciona un trozo longitudinal arbitrario explotando la simetría traslacional presente en esta dirección

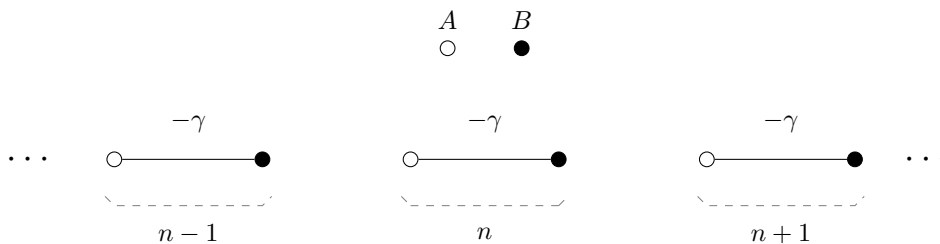


Figura 15: Estructura del modo $k = \pi/2$ de un aGNR con ancho N_y impar

conducen. Esto concluye con un peak en la densidad de estados sin firma en la transmitancia, tal como se ve en el panel derecho de la Figura 13. Notar que en el caso $N_y = 4$, dado que el ancho es par en términos de la cantidad de dímeros que conforman la celda unitaria, no tenemos bandas planas, por lo que este estado tipo delta directamente no aparece. Por último, vemos **singularidades de Van Hove** en ambos casos simulados, y esto se debe a los cruces de banda que se tienen en esas energías. Estos perfiles son hiperbólicos por un lado, lo que se traduce en una apertura/cierre de un nuevo canal de transmitancia, tal como se ve en ambos paneles de la Figura 13. Una forma rápida de comprobar esto es observar las relaciones de dispersión pertinentes presentes en la Figura 12, fijar una energía en específico y **contar** las bandas que crucen esa energía. Dado que estamos en el régimen de nanocinta prístina, cada modo transmite de manera perfecta, por lo que solo basta con contar los modos transversales disponibles para así obtener el valor de la transmitancia del sistema.

Por último, analizaremos la **densidad local de estados**, y en particular para $E = \gamma$ en sistemas con N_y impar. Esto, para ver de qué manera se localizan estos estados con velocidad de grupo nula a lo largo de la nanocinta. Para esto, expresamos la densidad local de estados de la siguiente manera:

$$\text{LDOS}(E) = -\frac{1}{\pi} \Im \left[\hat{G}(E) \right] \quad (7.32)$$

y computamos esta expresión para cada sitio descrito por $\hat{G}(E)$. Esto da como resultado lo que se ve en la Figura 14. Este patrón de localización se fundamenta en lo siguiente. Si observamos la estructura modal efectiva presente en (7.17) y reemplazamos $k = \pi/2$, vemos que $\eta_{k=\pi/2} = 0$, como vimos antes, solo que ahora la interpretación es mucho más profunda, dado que la estructura para este modo en particular es la de dímeros desconectados entre sí, tal como se ve en el esquema presente en la Figura 15. Y esto explica el *peak* tipo delta en DOS sin incidencia en la transmitancia, dado que es son estados localizados en cada dímerno, y como no se conectan entre sí es **imposible** transmitir en esta configuración, por lo que se espera que la banda sea plana (velocidad de grupo nula) y que la localización sea en forma de dímeros apilados desconectados entre sí.

7.2. zGNR

A continuación haremos el mismo análisis para las nanocintas de grafeno con borde zigzag, o **zGNRs** de ahora en adelante. Este tipo de estructura es similar a un aGNR, solo que está rotada 60° , entendiéndose ahora el borde como una estructura zigzagueante (de ahí su nombre característico). A diferencia que en el caso aGNR, este sistema **no** se puede expresar en una escritura de modos transversales desacoplados usando una base tal que se cumpla la separación de espacios de Hilbert necesaria para el cálculo numérico, lo cual demostraremos en el análisis de las expresiones resultantes que obtendremos usando esta base. La

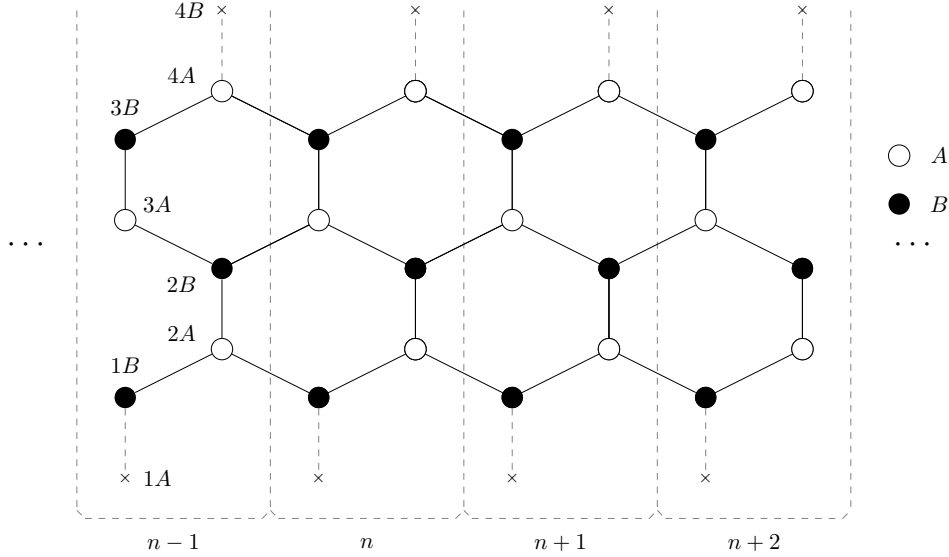


Figura 16: Indexación de celda unitaria para un zGNR con ancho transversal $N_y = 4$. Los átomos sólidos siguen la convención de colores predispuesta en la leyenda del esquema, y los átomos representados por un \times son átomos fantasma

indexación necesaria para este sistema y en conjunto y las soluciones analíticas y numéricas se presentan a continuación.

7.2.1. Espectro energético y autofunciones de zGNRs

Si observamos el esquema de indexación de la Figura 16, podemos dar con el siguiente hamiltoniano:

$$\hat{H} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sum_{m=1}^{N_y} \hat{a}_{nm}^\dagger (\hat{b}_{nm} + \hat{b}_{n-1,m-1} + \hat{b}_{n+1,m-1}) + \text{h.c.} \quad (7.33)$$

Y las OBCs están dadas simplemente por:

$$\hat{a}_{n,0} \equiv \hat{b}_{n,N_y} \equiv \hat{0} \quad (7.34)$$

Como dijimos previamente, con esta elección de base podemos separar el espacio de Hilbert total de la siguiente manera:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{intra}} \otimes \mathcal{H}_{\text{inter}} \quad (7.35)$$

En donde pensamos $\mathcal{H}_{\text{intra}}$ es el espacio de Hilbert para la zona intracelda de una celda unitaria, la cual se repite a lo largo de todo el sistema, y $\mathcal{H}_{\text{inter}}$ es el espacio de Hilbert que mezcla dos celdas unitarias adyacentes. Bajo esta lógica, podemos ahora construir el hamiltoniano del sistema de la siguiente manera:

$$\hat{H} = \sum_{n \in \mathbb{R}} \hat{H}_0 \otimes \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n + \hat{V} \otimes \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_{n+1} + \hat{V}^\dagger \otimes \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_{n-1} \quad (7.36)$$

en donde \hat{H}_0 es el hamiltoniano de la n -ésima celda unitaria, \hat{V} es el acoplamiento entre las celdas unitarias n y $n+1$ y \hat{c}_n^\dagger es el operador de creación para una celda unitaria en el índice de sitio n a lo largo del sistema. Los operadores intracelda e intercelda se definen como:

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{H}_0 = -\gamma \sum_{m=1}^{N_y} \hat{b}_m^\dagger \hat{a}_m + \hat{a}_m^\dagger \hat{b}_{m+1} + \text{h.c.} \\ \hat{V} = -\gamma \left[\sum_{m \text{ odd}}^{N_y} \hat{a}_m^\dagger \hat{b}_m + \sum_{m \text{ even}}^{N_y} \hat{b}_m^\dagger \hat{a}_m \right] \end{array} \right.$$

Notar que con esta convención, naturalmente definimos:

$$\hat{\sigma}_m \otimes \hat{c}_n := \hat{\sigma}_{nm} \quad (7.37)$$

con $\sigma = a, b$. De igual forma, tenemos **simetría** traslacional a lo largo de la dirección longitudinal con esta configuración, por lo que podemos hacer el proceso homólogo de imponer la transformada de Fourier que hicimos para el caso aGNR, obteniéndose:

$$\hat{H} = \sum_{q \in \text{BZ}} \left(\hat{H}_0 + e^{iq/2} \hat{V} + e^{-iq/2} \hat{V}^\dagger \right) \otimes \hat{c}_q^\dagger \hat{c}_q \quad (7.38)$$

En donde $q \in \text{BZ}$ es el momento **longitudinal** del sistema y se considera la mitad de este dado que \hat{c}_n condensa dos grados de libertad en uno, por lo que doblamos nuestra zona de Brillouin. Esta estructura para el hamiltoniano cumple con la condición necesaria para el cálculo numérico. No obstante, podemos aún así encontrar una forma cerrada para el autosistema y estructura modal de esta configuración con la misma elección de base. Si observamos la forma independiente de la paridad de m de (7.33), podemos imponer un spinor que sea una superposición de ondas planas con momento transversal k y buscar la condición de cuantización que este debe cumplir, similar al trabajo que hicimos para el aGNR. En particular, definimos el spinor:

$$|\Psi\rangle = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sum_{m=1}^{N_y} (\psi_{nm}^a \hat{a}_{nm}^\dagger + \psi_{nm}^b \hat{b}_{nm}^\dagger) |\mathbf{0}\rangle \quad (7.39)$$

Y si observamos la OBC dada por (7.34), debemos relacionar las subredes mediante la ecuación de Schrödinger. Tras imponer esto, obtenemos la siguiente relación:

$$\psi_{nm}^b = -\frac{\gamma}{E} (\psi_{nm}^a + \psi_{n+1, m+1}^a + \psi_{n-1, m+1}^a) \quad (7.40)$$

En donde E es la autoenergía del spinor $|\Psi\rangle$. Ahora, podemos proponer el ansatz de superposición de ondas planas dado por:

$$\psi_{nm}^\sigma = A_n^\sigma e^{ikm} + B_n^\sigma e^{-ikm} \quad (7.41)$$

Y con esto encontrar la condición para el momento transversal k . Viendo la primera OBC, tenemos:

$$\psi_{n,0}^a = 0 \implies \psi_{nm}^a = 2iA_n^a \sin(km) \quad (7.42)$$

Ahora, para imponer la segunda OBC, reemplacemos lo obtenido en (7.42) en la ecuación auxiliar (7.40):

$$\psi_{nm}^b = -\frac{2i\gamma}{E} \left(A_n^a \sin(km) + (A_{n+1}^a + A_{n-1}^a) \sin(k(m+1)) \right) \quad (7.43)$$

y ahora imponemos la OBC:

$$\psi_{n, N_y}^b = 0 \implies A_n^a \sin(kN_y) + (A_{n+1}^a + A_{n-1}^a) \sin(k(N_y + 1)) = 0 \quad (7.44)$$

Ahora, dada la simetría traslacional a lo largo de la dirección longitudinal previamente discutida, podemos separar el spinor total en los subespacios longitudinales y transversales según (7.35). Sabiendo que la base diagonal para este tipo de sistemas es la transformada de Fourier de los operadores de campo en la dirección simétrica, podemos efectivamente decir que:

$$A_n^\sigma = e^{iqn/2} A^\sigma \quad (7.45)$$

y con esto llegamos a la condición de cuantización para k :

$$\sin(kN_y) + g_q \sin(k(N_y + 1)) = 0 \quad (7.46)$$

En donde definimos $g_q := 2 \cos(q/2)$. Notamos que esta ecuación es una **ecuación trascendental**, por lo que k no tiene forma cerrada en términos de funciones elementales. Sin embargo, las soluciones se pueden calcular de manera numérica sin problema, y con esto obtener el espectro de valores para k . El análisis de esta ecuación la haremos en la siguiente sección, puesto que existe el fenómeno emergente de los **estados de borde**. Por ahora, sabemos a priori que estos valores existen y son calculables con métodos numéricos. Ahora bien, el hecho de que este momento transversal dependa justamente del momento longitudinal, como se ve en (7.46), hace imposible encontrar una **estructura modal desacoplada** para

este sistema, dado que para este tipo de estructuras es **necesario** que el hamiltoniano proyectado a un modo transversal (más precisamente, los coeficientes de la transformación transversal para los operadores de campo) **no** dependa de q para así poder separar ambos espacios y trabajar con un representante de uno de ellos para deducir el comportamiento a través de todos los modos. Lo bueno es que la base que considera el momento total dada por la combinación entre q y k **si** block-diagonaliza el hamiltoniano, y gracias a esto podemos obtener la relación de dispersión y las autofunciones. Primeramente, veamos que si observamos las componentes de los spinores obtenidas en (7.42) y (7.43), respectivamente, y reemplazamos los coeficientes dependientes de n según (7.45), obtenemos:

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_{nm}^a = C^a \sum_{q,k \in \text{BZ}} \underbrace{e^{iqn/2} \sin(km)}_{\psi_{q,k}^a} \\ \psi_{nm}^b = -\gamma C^a \sum_{q,k \in \text{BZ}} \underbrace{\frac{e^{iqn/2}}{E_{q,k}} \left(\sin(km) + g_q \sin(k(m+1)) \right)}_{\psi_{q,k}^b} \end{array} \right. \quad (7.47)$$

En donde $C^a := 2iA^a$ es el coeficiente de normalización a obtener usando métodos numéricos por la dependencia de k . Ahora, si imponemos la ecuación de Schrödinger para la componente de la subred A usando el hamiltoniano total presente en (7.33), llegamos a:

$$E\psi_{nm}^a = -\gamma(\psi_{nm}^b + \psi_{n-1,m-1}^b + \psi_{n+1,m-1}^b) \quad (7.48)$$

Luego, reemplazamos la expresión en el espacio de momento tanto para ψ_{nm}^a como para ψ_{nm}^b , obteniendo finalmente:

$$E_{q,k} = \pm\gamma\sqrt{1 + 2g_q \cos(k) + g_q^2} \quad (7.49)$$

lo cual es la **relación de dispersión** del sistema. En la Figura 17 se pueden ver ejemplos de cómo sería el perfil de esta relación de dispersión. Lo primero que se debe notar es que el número de bandas que aparecen en cada panel corresponde justamente a $N_y - 1$, por lo que podemos interpretar que cada subestructura dimeral rotulada por m vecinos entre orbitales corresponde a un canal de transmisión efectivo (obviamente esto no implica que sean canales desacoplados entre sí, tal como vimos previamente). Además, notamos la aparición de **bandas planas** en un cierto intervalo de q . Esto es interesante porque nuevamente podemos deducir que existen regiones energéticas del sistema en las cuales existe **localización de estados**. Esta localización la podremos observar una vez que analicemos las **propiedades de transporte** del sistema, pero antes nos gustaría entender y deducir la región de q en la cual surgen estas bandas planas.

7.2.2. Análisis del momento transversal

Debemos analizar la ecuación trascendental (7.46) la cual indica la cuantización del momento transversal k . Para ello, definimos:

$$F_g(k) := \sin(kN_y) + g_q \sin(k(N_y + 1)) \quad (7.50)$$

y la tarea se reduce a encontrar las raíces de $F_g(k)$. Luego, podemos considerar la forma dependiente de los **polinomios de Chebyshev**, recordando:

$$U_m(\cos(k)) = \frac{\sin(k(m+1))}{\sin(k)} \quad (7.51)$$

Entonces, si suponemos $x := \cos(k)$ y $k \in (0, \pi)$ para evitar el spinor trivial según lo obtenido en (7.47), podemos reescribir la ecuación trascendental, obteniéndose la siguiente definición:

$$\tilde{F}_g(x) := U_{N_y-1}(x) + g_q U_{N_y}(x) \equiv 0 \quad (7.52)$$

Ahora, podemos explotar el hecho de que las raíces de estos polinomios de Chebyshev tienen la forma:

$$U_{N_y-1}(x_j) = 0 \implies x_j = \cos\left(\frac{\pi j}{N_y}\right) \quad (7.53)$$

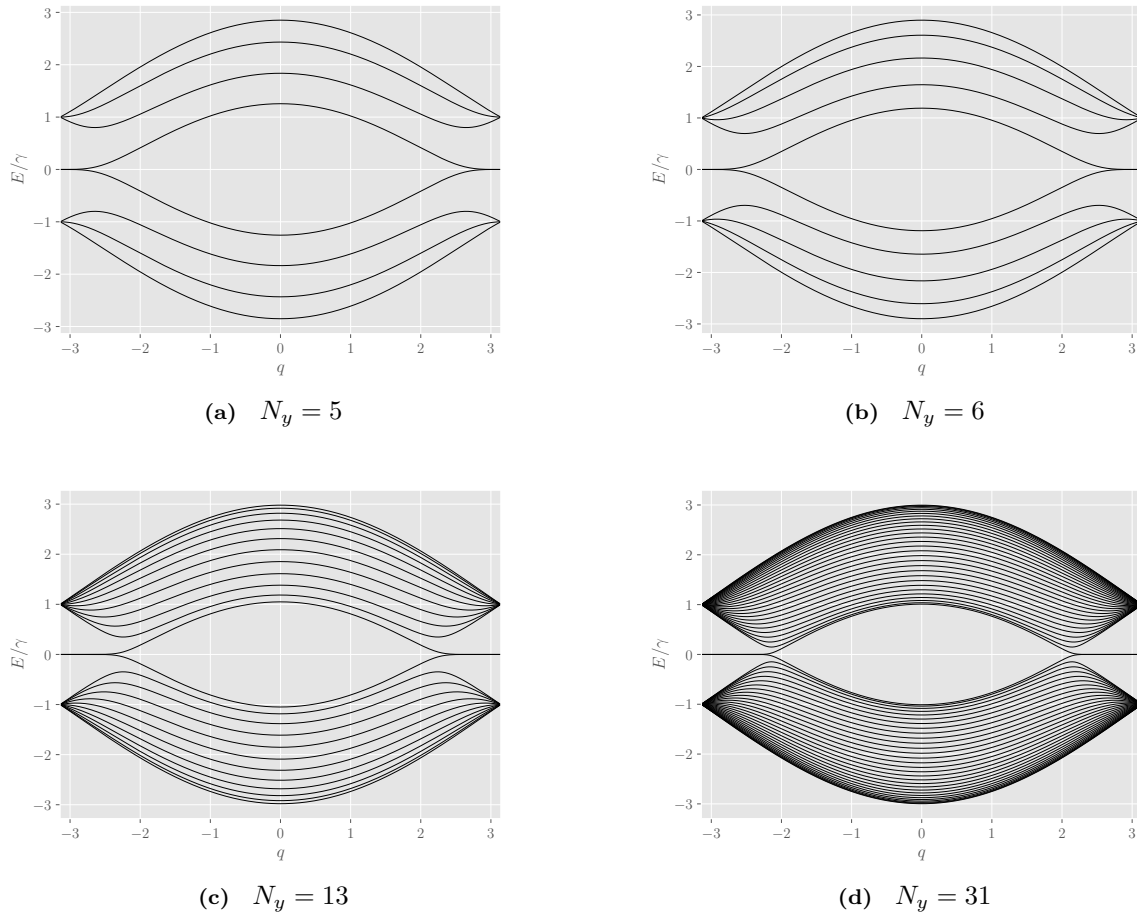


Figura 17: Relación de dispersión $E_{q,k}$ para un zGNR de diversos anchos transversales N_y .

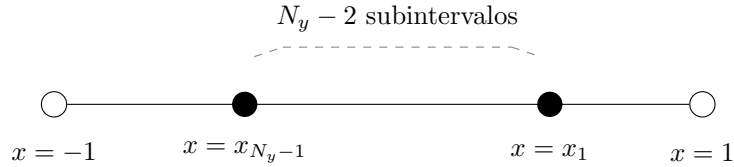


Figura 18: Esquema de partición del intervalo $(-1, 1)$

Y considerar la partición $\mathcal{P} := \{[x_{j-1}, x_j]\}_{j=1}^{N_y}$ para el intervalo $(-1, 1)$. En este sentido, definimos dos clases distintas de subintervalos; los subintervalos internos y los externos, tal como se puede ver en el esquema de la Figura 18. Analizando los **subintervalos internos**, podemos usar la propia definición de los polinomios de Chebyshev dada en (7.51) para encontrar una forma recursiva que nos permita relacionar $U_{N_y-1}(x)$ con $U_{N_y}(x)$, y con esto podemos ver que:

$$\tilde{F}_g(x_j) = (-1)^j g_q \quad (7.54)$$

Es decir, para cada subintervalo interno, los extremos tienen signos opuestos, por lo que por el **Teorema del Valor Intermedio** (TVI) podemos argumentar que **siempre** habrá una solución por cada subintervalo de este tipo, por lo que concluimos con $N_y - 2$ raíces hasta ahora. A continuación, nos centramos en los **subintervalos externos**. Usaremos la misma lógica para asegurar raíces mediante el TVI; los extremos de cada subintervalo externo deben tener signos opuestos para que exista una solución dentro de cada región. Esto lo expresamos de la siguiente manera:

$$\begin{cases} \tilde{F}_g(-1)\tilde{F}_g(x_{N_y-1}) < 0 \implies 1 \text{ raíz por TVI} \\ \tilde{F}_g(x_1)\tilde{F}_g(1) < 0 \implies 1 \text{ raíz por TVI} \end{cases} \quad (7.55)$$

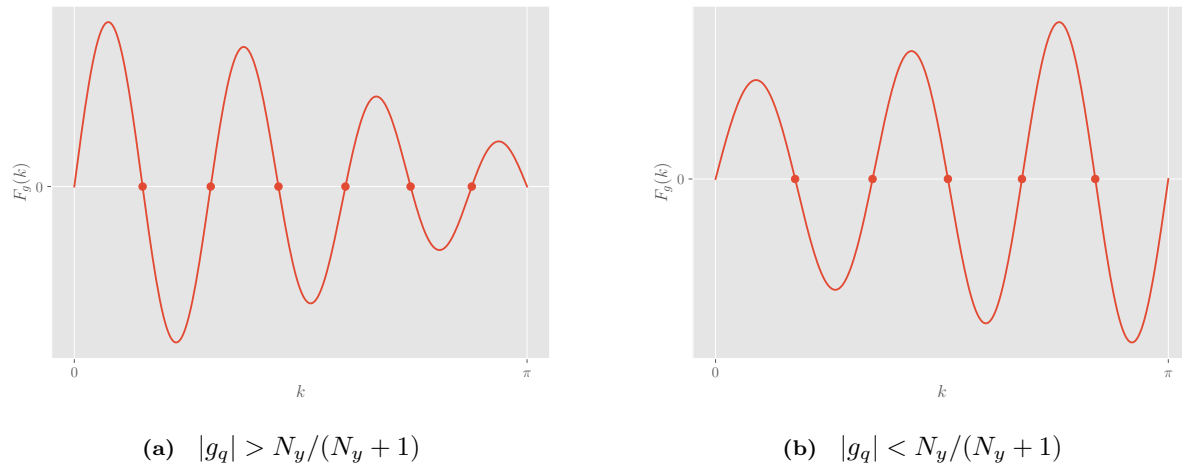


Figura 19: $F_g(k)$ con $N_y = 6$, considerando diversos valores para g_q . Los puntos sólidos demarcan las raíces de $F_g(k)$ para mayor claridad.

Usando lo anterior y las siguientes identidades útiles:

$$\begin{cases} \tilde{F}_q(-1) = -(-1)^{N_y}[(N_y) - g_q(N_y + 1)] \\ \tilde{F}_q(1) = N_y + g_q(N_y + 1) \end{cases} \quad (7.56)$$

Podemos llegar al siguiente perfil para el **número de soluciones** a la ecuación trascendental:

$$\#_{\text{sol}} = \begin{cases} N_y, & |g_q| > \frac{N_y}{N_y + 1} \iff q \in (-q_c, q_c) \\ N_y - 1, & |g_q| < \frac{N_y}{N_y + 1} \iff q \in (-\pi, -q_c) \cup (q_c, \pi) \end{cases} \quad (7.57)$$

En donde se define el **ángulo crítico** q_c de la siguiente manera:

$$q_c := 2 \cos^{-1} \left(\frac{N_y}{2(N_y + 1)} \right) \quad (7.58)$$

Lo cual es peculiar porque con esto decimos que la **cantidad** de modos transversales depende del valor de momento longitudinal del sistema, haciendo que en una región en específico un modo se *pierda*. Esto es así matemáticamente dado que la ecuación trascendental es una ecuación polinómica de orden N_y , por lo que siempre habrán N_y soluciones por el Teorema Fundamental del Álgebra. Lo que ocurre en particular es que al trabajar la ecuación definiendo $x := \cos(k)$, estamos confinando el análisis a $x \in (-1, 1)$, pero justamente en la región en donde una solución se pierde, es porque se sale de este intervalo propuesto. La única forma para seguir a este modo cuando se sale de este intervalo es considerando un valor de k complejo. En particular, la **continuación analítica** que hacemos es la siguiente:

$$k \mapsto k_q^c + i\eta \quad (7.59)$$

En donde definimos:

$$k_q^c = \begin{cases} 0, & q \in (-\pi, -q_c) \\ \pi, & q \in (q_c, \pi) \end{cases} \quad (7.60)$$

Y esto lo interpretamos como un **modo evanescente**, dado que si vemos la forma de las componentes del spinor k -dependiente de (7.42) y (7.43), estos dependen de términos sinusoidales en k , y si este valor de momento transversal pasa a ser complejo, entonces estos estados dejan de ser extendidos y pasan a tomar un perfil **hiperbólico**. Con esto en mente, podemos reemplazar esta continuación en la ecuación trascendental, quedando en una ecuación con una única solución para el pseudo-momento transversal η :

$$\begin{cases} \sinh(\eta(N_y)) + g_q \sinh(\eta(N_y + 1)) = 0, & q \in (-\pi, -q_c) \\ \sinh(\eta(N_y)) - g_q \sinh(\eta(N_y + 1)) = 0, & q \in (q_c, \pi) \end{cases} \quad (7.61)$$

Luego, tras obtener el valor de η , podemos computar la autoenergía asociada a este momento reemplazando la continuación analítica para k en (7.49), obteniéndose:

$$E_{\eta,q,\pm} = \begin{cases} \pm\gamma\sqrt{1+2g_q\cosh(\eta)+g_q^2}, & q \in (-\pi, -q_c) \\ \pm\gamma\sqrt{1-2g_q\cosh(\eta)+g_q^2}, & q \in (q_c, \pi) \end{cases} \quad (7.62)$$

lo cual reproduce el perfil de la banda plana que se ve en las relaciones de dispersión de la Figura 17. Otro aspecto importante de este cálculo es que tenemos acceso al punto en donde se ve la coalición de dos bandas en una sola banda plana. En este caso, si retornamos a (7.58) y consideramos el límite de **nanocinta ancha**, es decir $N_y \gg 1$, obtenemos:

$$\lim_{N_y \gg 1} q_c = \frac{2\pi}{3} \quad (7.63)$$

E imponiendo que $-q_c$ y q_c son los puntos en donde se crea esta banda plana, en este límite, estos corresponden a los puntos $(q, k) = \mathbf{K}^\pm$, los cuales son los **puntos de Dirac** para el grafeno.

Finalmente, podemos conseguir la forma del spinor asociado a la banda plana, mediante el reemplazo de la continuación analítica en (7.42) y (7.43) respectivamente. Esto nos entrega dos perfiles dependiendo de la región en donde se encuentre q . Si $q \in (-\pi, -q_c)$:

$$\begin{cases} \psi_{nm}^a = C^a \sum_{q,k \in \text{BZ}} e^{iqn/2} \sinh(\eta m) \\ \psi_{nm}^b = -\gamma C^a \sum_{q,k \in \text{BZ}} \frac{e^{iqn/2}}{E_{q,k}} \left(\sinh(\eta m) + g_q \sinh(\eta(m+1)) \right) \end{cases} \quad (7.64)$$

Por otro lado, si $q \in (q_c, \pi)$:

$$\begin{cases} \psi_{nm}^a = C^a \sum_{q,k \in \text{BZ}} e^{iqn/2} \sinh(\eta m) \\ \psi_{nm}^b = -\gamma C^a \sum_{q,k \in \text{BZ}} \frac{e^{iqn/2}}{E_{q,k}} \left(\sinh(\eta m) - g_q \sinh(\eta(m+1)) \right) \end{cases} \quad (7.65)$$

En ambos casos, vemos que la componente A se anula si $m = 0$ y empieza a crecer exponencialmente a medida que crece m . Por otro lado, el comportamiento es contrario para la otra componente. Si $m = N_y$, la componente B se anula y empieza a crecer a medida que m decrece. Esto nos dice que este estado degenerado se **localiza** en los bordes y se irradia hacia el bulto del sistema. Esto lo comprobaremos una vez tengamos la **densidad local de estados**.

7.2.3. Propiedades de transporte de zGNRs

De igual forma para el caso de las aGNRs, usaremos el formalismo de funciones de Green para computar estas propiedades. Primeramente, para la densidad de estados se obtiene lo que se ve en la Figura 20, en donde se ve un perfil similar que en el caso armchair, en términos de la aparición de singularidades de Van Hove, pero además aparece este nuevo estado en $E = 0$, el cual corresponde a estados situados en esta banda plana según la relación de dispersión. Estos estados son los que se localizan en los bordes, como discutimos previamente, y para observar esta localización, podemos computar la densidad local de estados.

Observando la Figura 21, vemos que, en efecto, se localiza este estado asociado a la banda plana en los extremos del material, considerando que el extremo inferior tiene orbitales tipo B y los del extremo superior orbitales tipo A , según la convención utilizada en el esquema de la Figura 16. Esto se condice fielmente a lo derivado en la sección anterior, en particular analizando el perfil del **estado evanescente** resultante. Por otro lado, tenemos singularidades de Van Hove de igual manera que en el caso de la terminación *armchair*; apertura/cierre de modos transversales, los que serían los canales dispersivos del material.

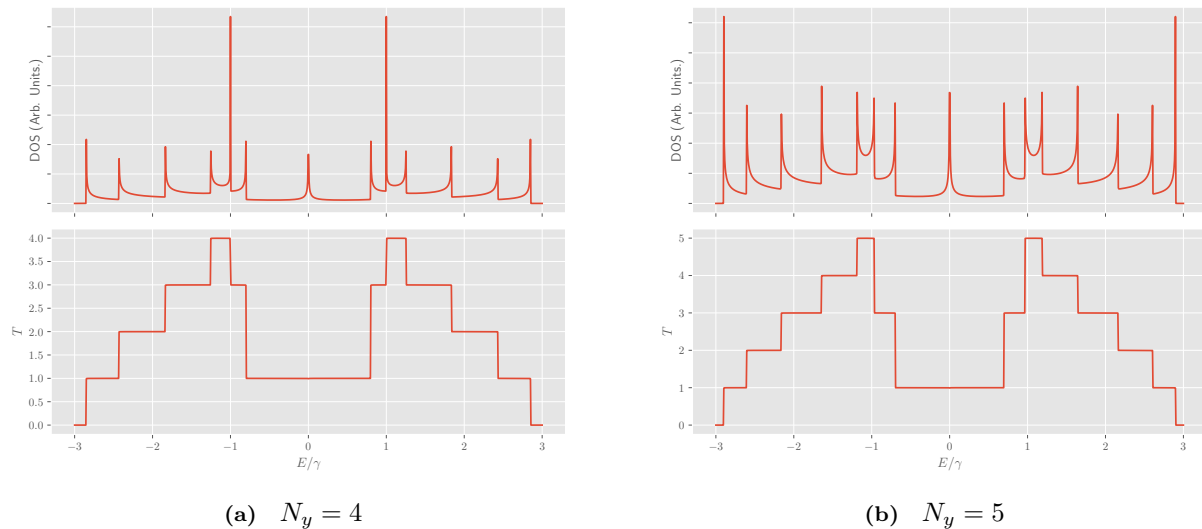


Figura 20: $T(E)$ y $DOS(E)$ para zGNRs de diversos anchos transversales N_y

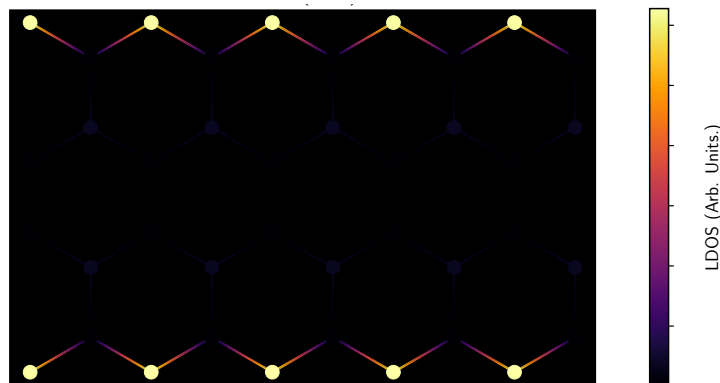


Figura 21: $LDOS(E = 0)$ para un zGNR con $N_y = 4$. Se selecciona un trozo longitudinal arbitrario explotando la simetría traslacional presente en esta dirección

8. Sistema bilayer

Este sistema es el primer tipo de **homoestructura** de grafeno que analizaremos, puesto que es el primer pilar de estudio para poder entender los efectos que se tienen en el **interferómetro** a analizar en la siguiente sección. La configuración esquemática se muestra en la Figura 22. En este caso, consideraremos un GNR tal como los previamente analizados, y en una zona en específico, sobrepondremos un **flake** de grafeno de la misma terminación, con stacking *AA*. Es decir, cada orbital inferior se conectará a su homólogo superior mediante un acoplamiento **Van der Waals**. Comúnmente se puede considerar este acoplamiento como una parte del acoplamiento intracelda γ , cumpliéndose:

$$\gamma' \cong \frac{\gamma}{10} \quad (8.1)$$

en donde γ' es el acoplamiento tipo Van der Waals. Otra cosa a considerar es que este sistema lo podemos replantear como un sistema de dos contactos con un dispositivo central, y bajo este planteamiento, los acoplamientos contacto-dispositivo tendrán **exactamente** el mismo perfil que los acoplamientos intracelda de la propia nanocinta infinita. Analizaremos este sistema para ambas terminaciones por separado.

8.1. Terminación *armchair*

Primeramente, analizaremos el comportamiento de la homoestructura compuesta por aGNRs. El esquema de esta configuración se muestra en la Figura 23. Si consideramos la elección de celda unitaria que nos permita obtener una **estructura modal desacoplada**, como se ve en la Figura 10, podemos escribir el

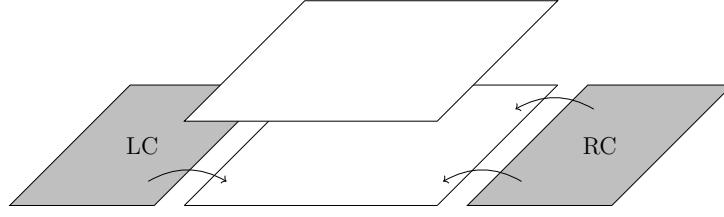


Figura 22: Esquema de una configuración bilayer compuesta por un flake de grafeno sobrepuesto a una nanocinta del mismo material. El **monolayer** inferior lo subdividimos tal que la región de scattering sea esta zona bilayer.

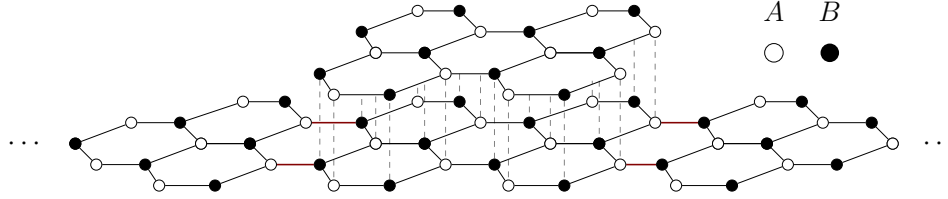


Figura 23: Esquema de configuración bilayer para un aGNR de ancho transversal $N_y = 5$ y un largo longitudinal $N_x = 2$ para la región bilayer.

hamiltoniano total de la zona bilayer de la siguiente manera:

$$\hat{H}_{\text{Bi}} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (8.2)$$

En donde:

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{H}_0 := -\gamma \sum_{\alpha=\downarrow,\uparrow} \sum_{n=0}^{2N_x} \sum_{m=1}^{N_y} \hat{a}_{nm\alpha}^\dagger (\hat{b}_{nm\alpha} + \hat{b}_{n-1,m-1,\alpha} + \hat{b}_{n-1,m+1,\alpha}) + \text{h.c.} \\ \hat{V} := -\gamma' \sum_{n=1}^{2N_x} \sum_{m=1}^{N_y} \sum_{\sigma=A,B} \hat{\sigma}_{nm\uparrow}^\dagger \hat{\sigma}_{nm\downarrow} + \text{h.c.} \end{array} \right. \quad (8.3)$$

La razón de porque consideramos $n \in [0, 2N_x] \cap \mathbb{N}$ es porque en esta representación estamos **doblando** la zona de Brillouin, como discutimos previamente en la sección anterior. Otra cosa importante a considerar es que ahora existen condiciones de borde **longitudinales** para el flake superior. Si ahora analizamos el problema modo por modo mediante la representación modal, podemos llegar al siguiente hamiltoniano:

$$\hat{H}_k = \hat{H}_{0,k} + \hat{V}_k \quad (8.4)$$

En donde:

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{H}_{0,k} := - \sum_{\alpha=\downarrow,\uparrow} \left[\sum_{n=1}^{2N_x-1} \gamma \hat{a}_{nk\alpha}^\dagger \hat{b}_{nk\alpha} + \text{h.c.} + \sum_{n=1}^{2N_x} \eta_k \hat{a}_{nk\alpha}^\dagger \hat{b}_{n-1,k,\alpha} + \text{h.c.} \right] \\ \hat{V}_k := -\gamma' \sum_{\sigma=A,B} \left[\sum_{n=1}^{2N_x-1} \hat{\sigma}_{nk\uparrow}^\dagger \hat{\sigma}_{nk\downarrow} + \text{h.c.} \right] - \gamma' (\hat{b}_{0k\uparrow}^\dagger \hat{b}_{0k\downarrow} + \hat{a}_{2N_x,k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{2N_x,k\downarrow} + \text{h.c.}) \end{array} \right. \quad (8.5)$$

La visualización de esta representación modal se muestra en la Figura 24. Antes de analizar las propiedades de transporte de este sistema, analicemos las propiedades locales, imponiendo las OBCs:

$$\hat{a}_{0,k,\alpha} \equiv \hat{b}_{2N_x,k,\alpha} = \hat{0} \quad (8.6)$$

con $\alpha = \downarrow, \uparrow$. Esto nos deja el sistema totalmente aislado de ambos contactos, lo que nos permite analizarlo de una manera sencilla. Para proseguir, consideremos la siguiente transformación asociada al grado de libertad α del sistema:

$$\hat{\sigma}_{nk\pm} := \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\sigma}_{nk\uparrow} \pm \hat{\sigma}_{nk\downarrow}) \quad (8.7)$$

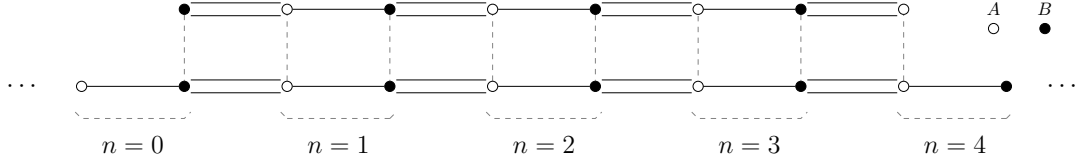


Figura 24: Esquema de la estructura modal para un sistema bilayer aGNR con stacking AA de largo longitudinal $N_x = 2$. Las líneas sólidas son acoplamientos $-\gamma$ y las líneas dobles son acoplamientos $-\eta_k := -2\gamma \cos(k)$

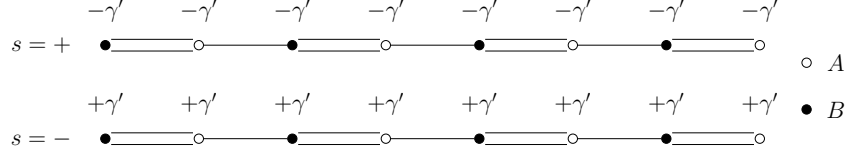


Figura 25: Estructura modal efectiva en la base **bonding/antibonding** para un bilayer de aGNR. Las líneas sólidas son acoplamientos $-\gamma$ y las líneas dobles son acoplamientos $-\eta_k := -2\gamma \cos(k)$

Esta transformación es la separación en la parte **simétrica/antisimétrica** del sistema. Veamos que la inversa de esta transformación luce de la siguiente manera:

$$\begin{cases} \hat{\sigma}_{nk\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\sigma}_{nk+} + \hat{\sigma}_{nk-}) \\ \hat{\sigma}_{nk\downarrow} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\sigma}_{nk+} - \hat{\sigma}_{nk-}) \end{cases} \quad (8.8)$$

Entonces, al reemplazar en los hamiltonianos presentes en (8.5) obtenemos:

$$\begin{cases} \hat{H}_{0,k} = - \sum_{s=+,-} \left[\sum_{n=1}^{2N_x-1} \gamma \hat{a}_{nks}^\dagger \hat{b}_{nks} + \text{h.c.} + \sum_{n=1}^{2N_x} \eta_k \hat{a}_{nks}^\dagger \hat{b}_{n-1,k,s} + \text{h.c.} \right] \\ \hat{V}_k = -\gamma' \sum_{s=+,-} \varepsilon_s \left[\sum_{n=1}^{2N_x-1} \sum_{\sigma=A,B} (\hat{\sigma}_{nks}^\dagger \hat{\sigma}_{nks}) - (\hat{b}_{0ks}^\dagger \hat{b}_{0ks} + \hat{a}_{2N_x,ks}^\dagger \hat{a}_{2N_x,ks}) \right] \end{cases} \quad (8.9)$$

En donde hemos definido:

$$\varepsilon_s := \begin{cases} 1, & s = + \\ -1, & s = - \end{cases} \quad (8.10)$$

Esta transformación efectivamente desacopla las cadenas SSH, incorporando energías de sitio efectivas para ambas de ellas, tal como se muestra en la Figura 25. Notemos que tras esta separación que hemos hecho, hemos logrado obtener la estructura modal efectiva del sistema, la cual se compone de dos canales independientes entre sí por cada modo transversal. Si ahora incorporamos los contactos, veremos que estos modos se **mezclan**. Viendo la Figura 24, notamos que los acoplamientos contacto-dispositivo se escriben:

$$\begin{cases} \hat{V}_k^{\text{LC}} = -\gamma \hat{a}_{0k\downarrow}^\dagger \hat{b}_{0k\downarrow} + \text{h.c.} \\ \hat{V}_k^{\text{RC}} = -\gamma \hat{b}_{2N_x,k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{2N_x,k\downarrow} + \text{h.c.} \end{cases} \quad (8.11)$$

Por lo que si ahora imponemos la transformación hacia la base bonding/antibonding presente en (8.8), llegamos a lo siguiente:

$$\begin{cases} \hat{V}_k^{\text{LC}} = -\frac{\gamma}{\sqrt{2}} \hat{a}_{0,k}^\dagger (\hat{b}_{0k+} - \hat{b}_{0k-}) + \text{h.c.} \\ \hat{V}_k^{\text{RC}} = -\frac{\gamma}{\sqrt{2}} \hat{b}_{2N_x,k}^\dagger (\hat{a}_{2N_x,k+} - \hat{a}_{2N_x,k-}) + \text{h.c.} \end{cases} \quad (8.12)$$

Lo que claramente demuestra que en estos puntos de conexión hacia los contactos, existe una mezcla de estos canales efectivos de transmisión, por lo que esperamos obtener fenómenos de **interferencia** entre estos canales, los cuales ocurren justamente en estos nodos, como se ve en la Figura 26.

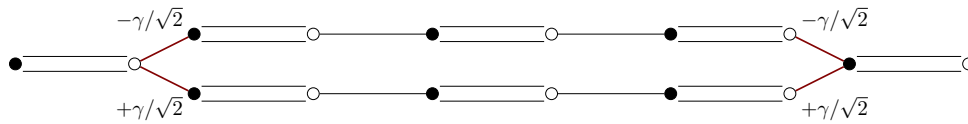


Figura 26: Estructura modal del sistema de transporte para un dispositivo bilayer aGNR con stacking AA en la base **bonding/antibonding**.

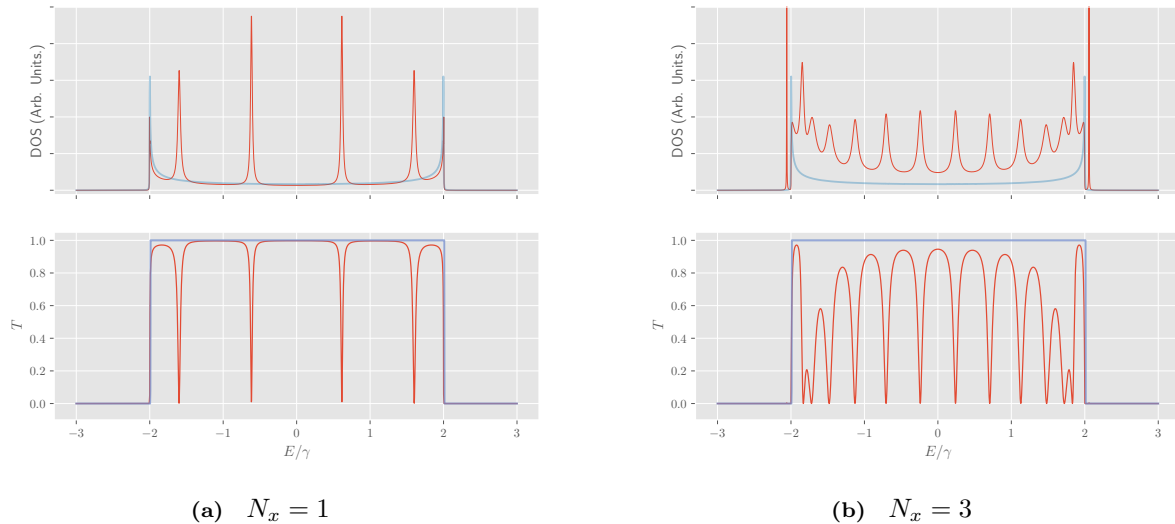


Figura 27: DOS(E) y $T(E)$ para un sistema bilayer aGNR con stacking AA, considerando $\gamma' = \gamma/10$ y $N_y = 2$. Las sombras azules son los resultados para una nanocinta prístina de la misma geometría que el sistema de análisis.

8.2. Resultados numéricos para aGNRs

Siguiendo el flujo de trabajo numérico descrito en la Sección 5, podemos computar la **densidad de estados** y la transmitancia del sistema, en donde lo último lo entenderemos como la conductancia en unidades de $G_0 := 2e/h$. Nos centraremos en la **fase metálica** de este sistema, considerando $N_y = 3l - 1$, con $l \in \mathbb{N}$, dado que así podemos comparar el comportamiento entre sistemas con distintas terminaciones, recordando que un zGNR está siempre en una fase metálica, debido a que es una configuración *gapless*. Desde esto, vemos que un solo canal en esta fase se describe por $N_y = 2$, por lo que primero entenderemos el perfil de esta configuración para luego deducir el comportamiento de sistemas más anchos.

Observando la Figura 27, podemos ver justamente efectos de interferencia en este canal, los cuales dependen del largo longitudinal del sistema. Esto es esperable, según lo que derivamos previamente, dado que esta mezcla de canales bonding/antibonding que constituyen el modo que estamos analizando **interfieren** entre sí en las conexiones a los contactos, según lo esquematizado en la Figura 26.

Esta mezcla de canales por modo genera estados que **no** transmiten, dada la diferencia de fase que hace que ambos canales se anulen, y este efecto depende del largo N_x , como se ve analizando cada panel de la Figura 27. En general, el patrón es que existen $2N_x$ dips de transmitancia en cada configuración para la parte electrónica (para la parte relacionada a los huecos es equivalente, dada la simetría partícula-hueco existente en el sistema tras considerar energías de sitio nulas en el sistema en la red directa).

Podemos profundizar el entendimiento de este sistema viendo la localización de estos estados no-radiantes, y para ello computamos la **densidad local de estados**. En este caso, como sabemos que los dips en transmitancia se producen por la interferencia entre los canales bonding/antibonding de cada modo, esperamos que estas interferencias se den justamente en las energías permitidas por el flake superior, y que sus estados propios sean las energías de los dips. Si observamos la Figura 28, podemos notar que, en efecto, la localización de estos estados no-radiantes son configuraciones las cuales son **autoestados** del subsistema

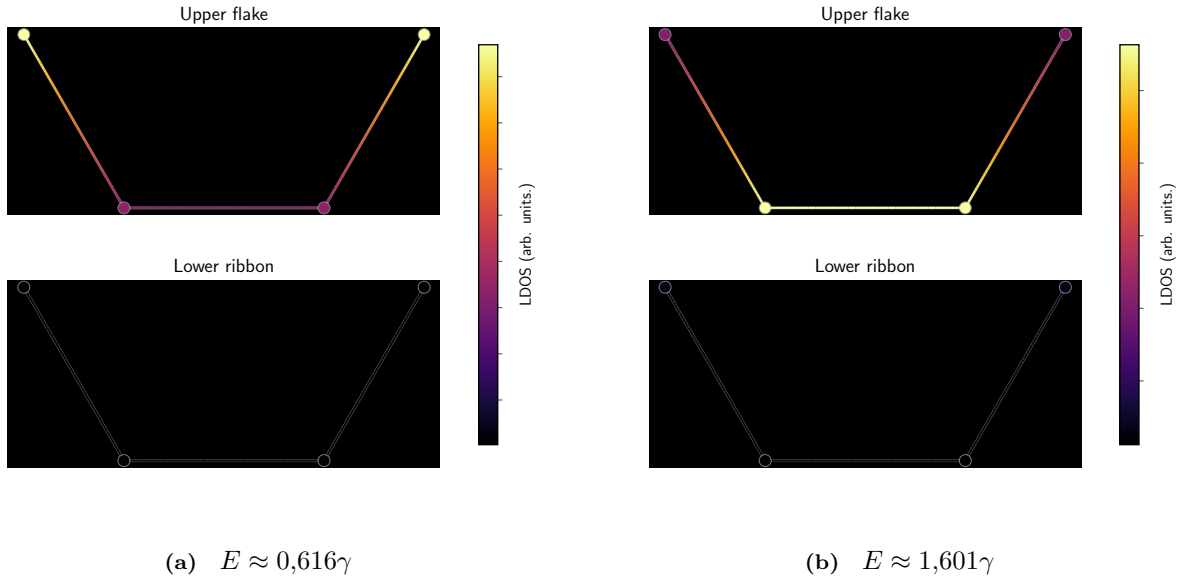


Figura 28: LDOS(E) para las energías de cada dip de transmitancia para un sistema bilayer aGNR con $N_y = 2$ y $N_x = 1$

del flake aislado (armónicos del sistema, representados en la base de posición de la red directa). Esto lo podemos entender mediante la idea de que el flake superior afecta a la nanocinta perturbativamente, y esta separación entre canales bonding/antibonding se debe a esto. Sin embargo, las energías permitidas para el flake son **finitas**, y si la energía del electrón en el proceso de scattering dentro del sistema coincide con las autonergías del flake, la perturbación alcanza el máximo de amplitud, por lo que los fenómenos de interferencia se centran en estas energías. Bajo esta lógica, podemos pensar este sistema como una **barrera de potencial** para el continuo, el cual representamos con la nanocinta en este modelo. Esta intuición será útil para poder llegar con el sistema de la siguiente sección.

Por otro lado, dada esta interferencia entre canales, la singularidad de Van Hove dada en el borde del canal se empieza a romper, generando un perfil cada vez más suavizado en estos extremos de la banda. El estado tipo delta restante fuera de la banda se entiende como la acción de interferencia entre el estado bonding y el antibonding en esta energía, desdoblado este estado en dos partes, una dentro de la banda, lo que genera ese perfil de transmitancia suavizado en el borde, y otra la cual es el estado tipo delta no-radiante.

Ahora que entendemos a cabalidad la acción del largo longitudinal N_x sobre un único modo del sistema, y el perfil de este, comprobando que existe esta mezcla de los canales bonding/antibonding, podemos empezar a analizar el caso minimal de este sistema aGNR bilayer, en el cual la terminación tendrá una firma en los resultados. En este caso, consideramos $N_y = 5$ como el primer caso en donde tendremos a lo máximo dos canales, considerando el sistema en su fase metálica. Las simulaciones las vemos presentes en la Figura 29. En particular, si vamos analizando cada panel, vemos que existe la misma dependencia entre la cantidad de dips en transmitancia y N_x para cada canal, solo que ahora este efecto ocurre dos veces con frecuencia distinta dados los dos canales diferenciados por el valor de η_k en cada modo, lo que varía la estructura de los acoplamientos de este. Además, el mismo efecto que hace que se desdoblén los estados tipo Van Hove sigue apareciendo, solo que ahora afecta a los bordes de cada modo que se abre o se cierra.

Además, vemos que en la configuración $N_y = 5$ aparece una banda plana en $E_0 = \pm\gamma$ en la relación de dispersión, tal como dedujimos previamente, por lo que en el límite de nanocinta prístina existe un estado tipo delta en esta energía. Al perturbar esta nanocinta con el flake superior, este estado se desdobra debido a la hibridación de estados bonding/antibonding, creando dos estados tipo delta distintivos en $E = E_0 \pm \gamma'$.

Por último, observando la Figura 30, vemos que la localización de los estados desdoblados en $E = E_0 \pm \gamma'$

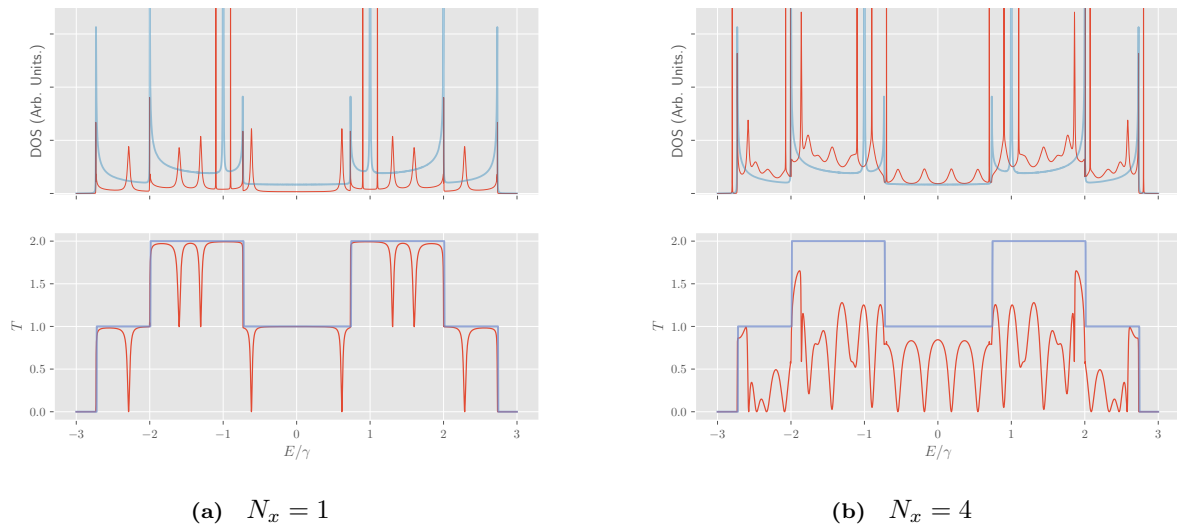


Figura 29: DOS(E) y $T(E)$ para un sistema bilayer aGNR con stacking AA, considerando $\gamma' = \gamma/10$ y $N_y = 5$. Las sombras azules son los resultados para una nanocinta prístina de la misma geometría que el sistema de análisis.

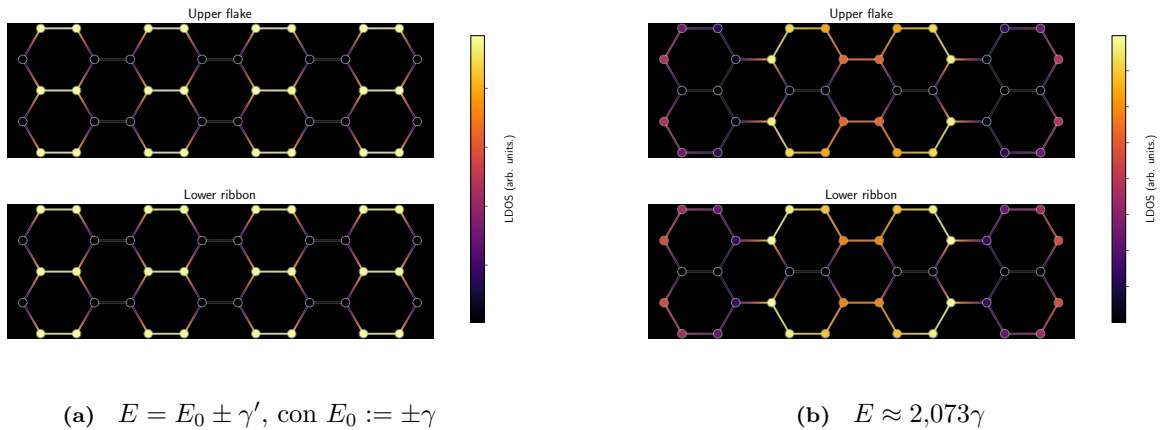


Figura 30: LDOS(E) para (a) $E = E_0 \pm \gamma'$ (b) el estado tipo delta proveniente de la singularidad de Van Hove en $E = 2\gamma$, considerando $E_0 := \pm\gamma$, para un sistema bilayer aGNR con $N_y = 5$ y $N_x = 4$

sigue exactamente el mismo patrón que en el caso de nanocinta prístina, lo que tiene sentido, dado que la perturbación del flake en E_0 se interpreta como la hibridación entre dímeros, los cuales están desacoplados, según lo que analizamos en la sección anterior. Esta hibridación desdobra este estado degenerado producido por los dímeros tanto de la nanocinta como el flake en estructuras bonding/antibonding, con sus respectivas energías. Por otro lado, sabemos que los estados tipo Van Hove se desdoblan debido a la perturbación del flake, y si consideramos sistemas multicanales, vemos que este desdoblamiento implica un estado tipo delta no-radiante existente en el canal aledaño. La localización de este tipo de estados la podemos extraer de la configuración con $N_x = 4$ y $N_y = 5$, siguiendo el desdoblamiento de la singularidad de Van Hove en $E = 2\gamma$ presente en la nanocinta prístina, y con esto computamos la densidad local de estados, cuyo perfil se muestra en el panel derecho de la Figura 30.

8.3. Terminación zigzag

Al observar la Figura 31, podemos notar que las **configuraciones unimodales** del sistema describen la misma red en términos de dímeros, por lo que los fenómenos de interferencia debido a la mezcla de canales bonding/antibonding son los mismos, incluyendo la dependencia con el largo longitudinal N_x . Esto lo com-

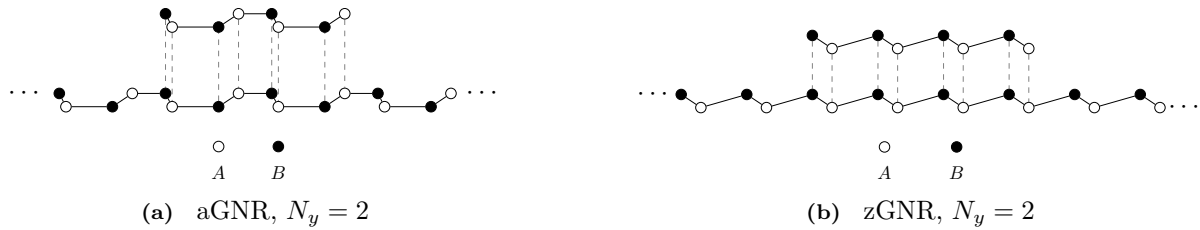


Figura 31: Esquemas de las configuraciones unimodales equivalentes entre terminaciones para un sistema bilayer.

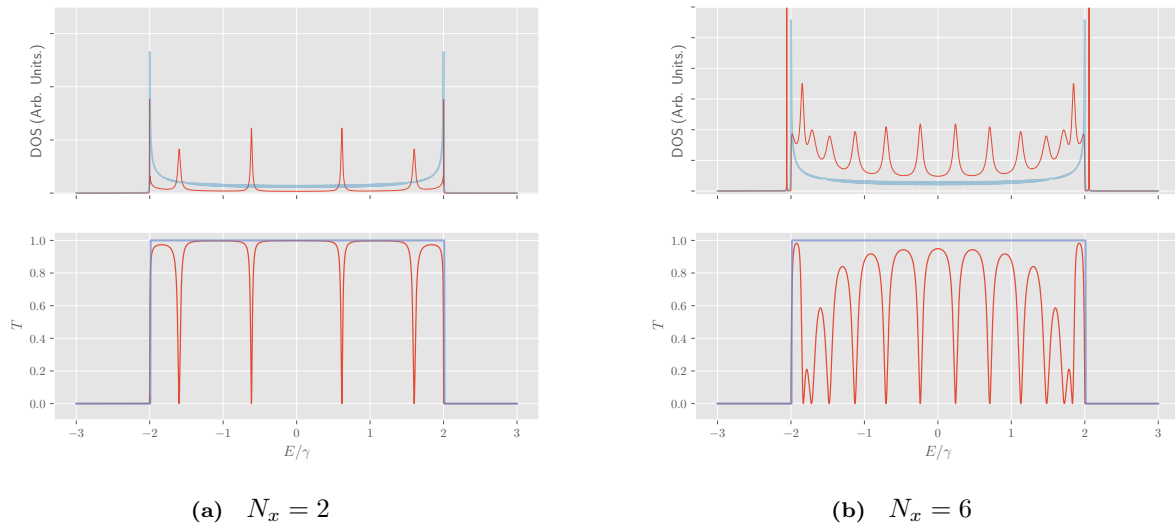


Figura 32: DOS(E) y $T(E)$ para un sistema bilayer zGNR con stacking AA , considerando $\gamma' = \gamma/10$ y $N_y = 1$. Las sombras azules son los resultados para una nanocinta prístina de la misma geometría que el sistema de análisis.

probamos simulando los sistemas zGNR con el **doble** de dímeros (esto es, $N_x \mapsto 2N_x$), dado que la celda unitaria que usamos para simular el sistema aGNR se compone de dos dímeros, como se ve en la Figura 9.

En particular, si observamos la Figura 32, notamos que los resultados se condicen con lo discutido previamente, debido a que son idénticos a los de la configuración unimodal equivalente con la otra terminación presentes en la Figura 27. Desde esto deducimos que el fenómeno de interferencia impuesto por el flake superior se presenta de la misma manera para cada canal del sistema respectivo. La diferencia entre las terminaciones se debe única y exclusivamente a **cómo se mezclan estos modos**. Si analizamos el sistema aGNR, este era diagonal en el espacio de modos transversales, entonces basta con entender el comportamiento de uno de ellos para luego generalizar hacia todo el sistema. Para escribirlo de manera más formal, el espacio de Hilbert asociado a un sistema simétrico en la dirección transversal se descompone de la siguiente manera:

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{k \in \text{BZ}} \mathcal{H}_k \quad (8.13)$$

Sin embargo, para el caso zGNR no pasa esto, debido a que los modos se mezclan inherentemente, como discutimos previamente. De igual manera, pese a que la estructura modal no esté desacoplada, los canales de conducción disponibles se reestructuran de igual manera, dado que la incidencia del flake provoca la partición de cada modo en subcanales bonding/antibonding, **independiente** de si estos están mezclados o no. Para mostrar esto, nos referimos a la Figura 33 para considerar el siguiente hamiltoniano:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (8.14)$$

con:

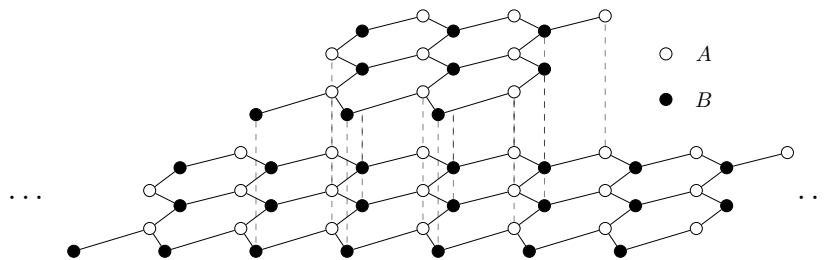


Figura 33: Esquema de configuración bilayer para un zGNR de ancho transversal $N_y = 4$ y un largo longitudinal $N_x = 3$ para la región bilayer

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{H}_0 := -\gamma \sum_{\alpha=\downarrow,\uparrow} \sum_{n=1}^{N_x} \sum_{m=1}^{N_y} \hat{a}_{nm\alpha}^\dagger (\hat{b}_{nm\alpha} + \hat{b}_{n-1,m-1,\alpha} + \hat{b}_{n+1,m-1,\alpha}) + \text{h.c.} \\ \hat{V} := -\gamma' \sum_{n=1}^{N_x} \sum_{m=1}^{N_y} \sum_{\sigma=A,B} \hat{\sigma}_{nm\uparrow}^\dagger \hat{\sigma}_{nm\downarrow} + \text{h.c.} \end{array} \right. \quad (8.15)$$

Si imponemos la misma transformación hacia la base bonding/antibonding para los operadores de campo $\hat{\sigma}_{nm\alpha}$ de la ecuación (8.8), considerando la parametrización $k \mapsto m$, los subhamiltonianos de este sistema quedan:

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{H}_0 := -\gamma \sum_{s=+,-} \sum_{n=1}^{N_x} \sum_{m=1}^{N_y} \hat{a}_{nms}^\dagger (\hat{b}_{nms} + \hat{b}_{n-1,m-1,s} + \hat{b}_{n+1,m-1,s}) + \text{h.c.} \\ \hat{V} := -\gamma' \sum_{n=1}^{N_x} \sum_{m=1}^{N_y} \sum_{\sigma=A,B} \hat{\sigma}_{nm+}^\dagger \hat{\sigma}_{nm+} - \hat{\sigma}_{nm-}^\dagger \hat{\sigma}_{nm-} \end{array} \right. \quad (8.16)$$

Lo que se interpreta como un sistema de dos flakes finitos de zGNR desacoplados con energías de sitio efectivas. Esto evidentemente produce dos subsistemas desacoplados, los cuales se acoplan en los contactos, de igual forma que en el caso *armchair*, en donde cada uno de estos tiene una relación de dispersión equivalente, pero desplazadas γ' entre sí, formando los subsistemas bonding y antibonding. Si bien no podemos obtener una forma analítica para visualizar los modos transversales desacoplados, podemos observar la acción de este potencial perturbativo sobre uno de los canales, y resulta que la acción de este sobre el sistema es invariante frente a la terminación, como vimos previamente. La única explicación para esto es que el potencial perturbativo tiene que ser **diagonal** en la base de momento transversal. Esto es evidente para el caso *armchair*, dado que podemos obtener la forma analítica del efecto del potencial en cada modo, y observando la segunda ecuación de (8.5), vemos efectivamente que el potencial perturbativo es diagonal en k . Por consiguiente, extendemos el argumento considerando que la acción es invariante frente a la terminación para afirmar que este potencial **no** mezcla modos inherentemente. Otra forma de comprobar esto es observar la relación de dispersión para cada terminación presente en la Figura 34 y notar que la acción del potencial perturbativo desplaza las relaciones de dispersión, independientemente de la terminación.

Por último, si observamos nuevamente la Figura 34 y analizamos el panel derecho, vemos que las bandas planas asociadas a los estados de borde se desdoblán en canales bonding/antibonding, por lo que debemos esperar que la acumulación de estados en torno a la energía de Fermi del sistema se separe justamente a medida que aumentamos el largo transversal N_x .

8.4. Resultados numéricos para zGNRs

Dado que sabemos que el efecto del potencial perturbativo impuesto por el flake sobre un modo singular es el mismo independientemente de la terminación del sistema, podemos analizar el primer caso en donde la terminación **si** tiene una firma en los resultados. En este caso, consideramos un sistema con ancho transversal $N_y = 3$ y seguimos el flujo de trabajo numérico señalado previamente. Los resultados para distintos largos se encuentran en la Figura 35. De esto vemos que los subcanales bonding/antibonding dentro de cada modo interfieren destructivamente, generando dips de transmitancia tal como en el caso

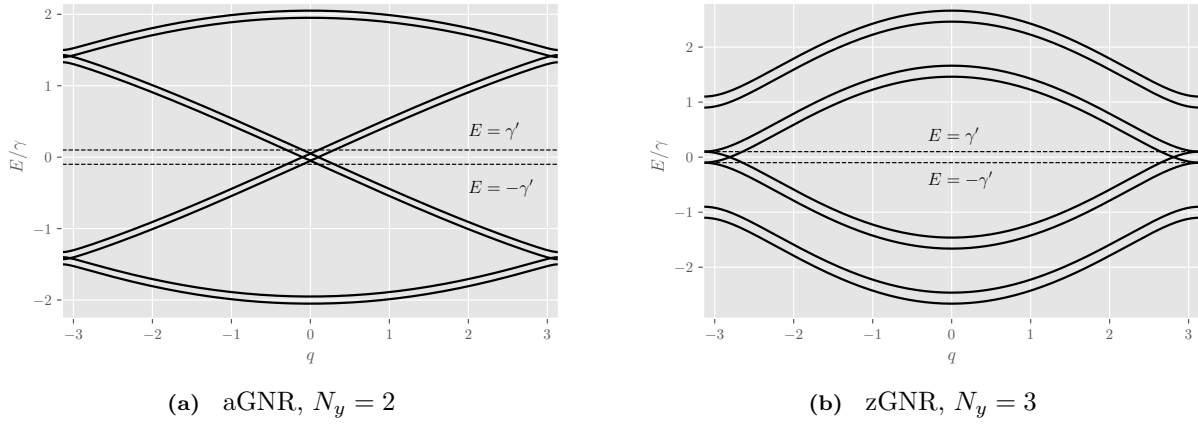


Figura 34: Relación de dispersión para un sistema bilayer de diferentes terminaciones considerando $\gamma' = \gamma/10$

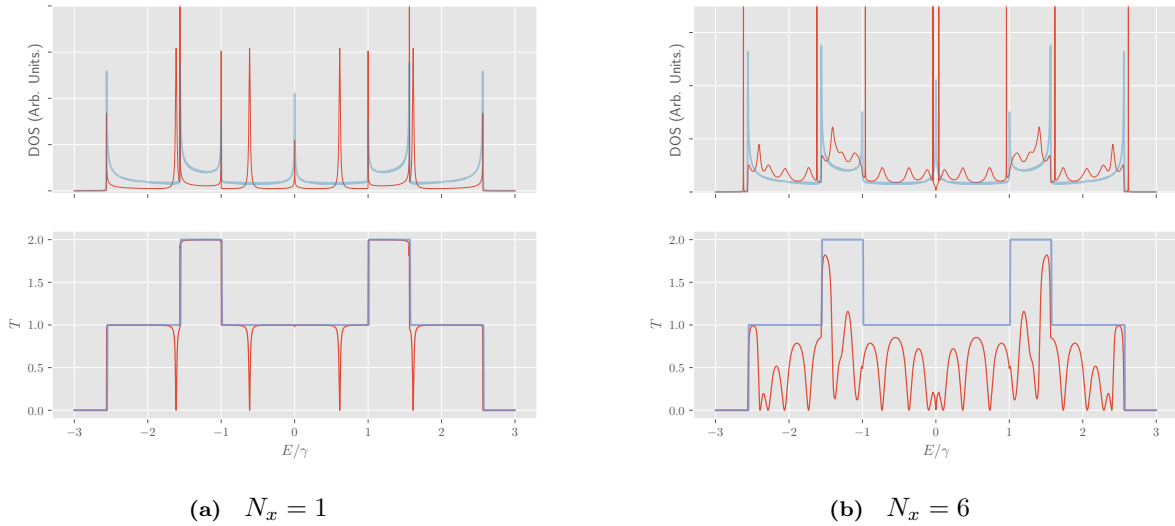


Figura 35: DOS(E) y $T(E)$ para un sistema bilayer zGNR con stacking AA, considerando $\gamma' = \gamma/10$ y $N_y = 3$. Las sombras azules son los resultados para una nanocinta prístina de la misma geometría que el sistema de análisis.

armchair. Vimos previamente que el efecto del flake sobre cada modo es el mismo independientemente la elección de terminación, pero al incluir el segundo modo en el caso *zigzag*, notamos diferencias con la otra terminación, y esto se debe a que la cuantización que selecciona los modos transversales disponibles no es la misma entre sistemas, lo que genera un espectro de modos transversales distintos, induciendo un patrón de interferencia distinto.

Sin embargo, lo que sigue siendo equivalente entre terminaciones es el desdoblamiento de los estados tipo Van Hove, los cuales se diseminan parcialmente; una parte hacia la banda precedente y otra hacia fuera de esta banda. El mecanismo que causa esto es exactamente el mismo que en el caso *armchair*, dado que podemos incluso ver este efecto para la configuración unimodal que es equivalente entre terminaciones, tal como se ve en la Figura 32. Por otro lado, vemos que el estado de borde se empieza a desdoblarse a medida aumentamos el largo longitudinal N_x de la parte bilayer. Esta dependencia la podemos observar claramente en la Figura 36, en donde se deduce que este estado se desdobra perfectamente en el sistema bilayer infinito.

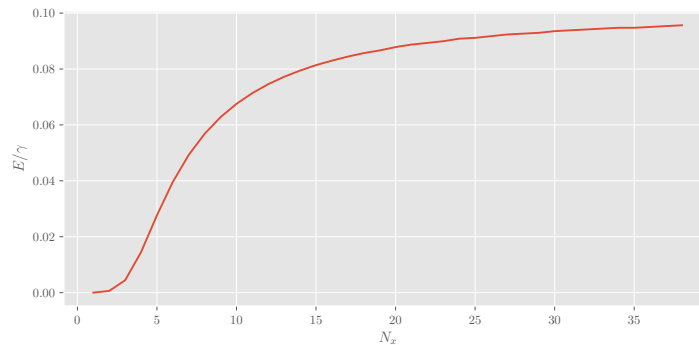


Figura 36: Energía del estado de borde tipo delta proveniente del desdoblamiento causado por el flake superior en la terminación zGNR, considerando $N_y = 3$ y $\gamma' = \gamma/10$

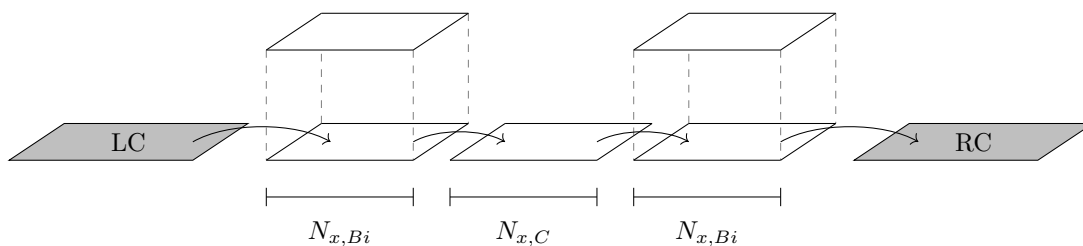


Figura 37: Esquema de la geometría de un sistema Fabry-Pérot. LC/RC son los contactos respectivos, y las distancias demarcadas en la figura son en términos de celdas unitarias. La estructura inferior completa es un GNR prístino de una terminación en específico, y las estructuras superiores son flakes de la misma terminación

9. Sistema Fabry-Pérot

Finalmente, analizaremos la propuesta de un sistema el cual emula el efecto de una doble barrera de potencial mediante la disposición de dos flakes de grafeno sobre una nanocinta de la misma terminación, con stacking AA , tal como se ve en la Figura 37. De igual manera que con la homoestructura previa, analizaremos para cada terminación por separado el comportamiento del respectivo sistema, basándonos en el conocimiento que desarrollamos en la sección previa. La idea de haber entendido a cabalidad la homoestructura anterior es que ahora sabemos que los nuevos comportamientos que tenga este sistema se deberán netamente a la interacción entre estas dos zonas bilayer separadas por una distancia. La idea fundamental detrás de esta configuración es la búsqueda y descripción de **estados ligados en el continuo**, debido al atrapamiento de estados entre estas dos zonas bilayer.

9.1. Comportamiento general del sistema

De la misma manera que logramos separar el dispositivo de los contactos, generando una estructura efectiva para este en el caso bilayer, podemos pensar el presente sistema como una zona bilayer, seguida de un monolayer inferior y finalmente otra zona bilayer. Esta disposición será útil a la hora de simular el sistema para observar el comportamiento y las propiedades de este de manera numérica. Sin embargo, podemos reescribir el problema de tal forma que ahora nuestra celda unitaria sea cualquiera de los flakes superiores, considerando que ambos son equivalentes entre sí. La razón de por qué esto es posible es debido a que la estructura inferior tiene simetría traslacional y, en particular, consideramos la aproximación de que tiene largo infinito, por lo que la descripción del monolayer inferior total es **independiente** de la elección de celda unitaria. Con esto en mente, podemos reformular el sistema según lo establecido en la Figura 38 y comenzar a analizar de manera genérica el sistema. Sabemos a priori que ambos flakes interfieren destructivamente según lo analizado en la sección anterior. Sin embargo, la inclusión de dos resonadores como estos separados por una cierta distancia incorpora otro fenómeno de resonancia, el cual dependerá del largo central $N_{x,C}$, y debido a tener dos fuentes de interferencia independientes entre sí, existe la posibilidad de obtener **estados ligados en el continuo**. Esto, dado que puede existir una

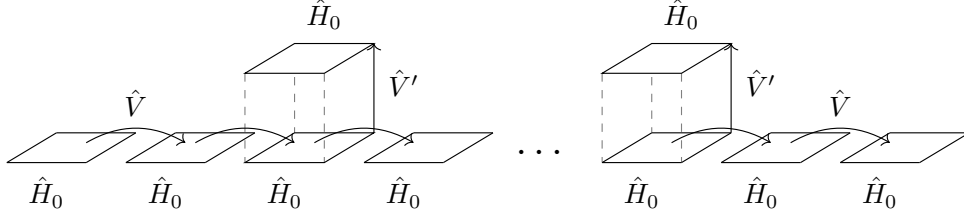


Figura 38: Esquema efectivo para el sistema Fabry-Pérot

configuración en términos de los parámetros del sistema tal que un estado el cual es resonante en uno de los resonadores sufra un *shift* en su fase debido a la distancia recorrida en el centro del sistema y termine siendo antirresonante en el otro. Esto, en efecto, se piensa como un estado total del sistema el cual queda confinado entre los resonadores, sin acoplamiento hacia el continuo. A continuación encontraremos la condición de parámetros que nos garantiza la existencia de uno (o más) de estos estados. Para ello, observando el esquema de la Figura 38, podemos notar que la estructura que se forma en la parte inferior se comporta como una **cadena lineal** infinita, con grados de libertad intracelda, descrita por el siguiente hamiltoniano en el espacio de momento longitudinal:

$$\hat{H}_{\text{inf}} = \sum_{q \in \text{BZ}} (\hat{H}_0 + e^{iq} \hat{V} + e^{-iq} \hat{V}^\dagger) \otimes \hat{c}_q^\dagger \hat{c}_q \quad (9.1)$$

Desde aquí, podemos obtener la relación de dispersión de la capa inferior de la siguiente manera:

$$\det(E_q - \hat{H}_0 - e^{iq} \hat{V} - e^{-iq} \hat{V}^\dagger) = 0 \quad (9.2)$$

Por otro lado, los flakes actúan como una perturbación local sobre las celdas respectivas de la estructura inferior, y su acoplamiento \hat{V}' , considerado desde abajo hacia arriba, contiene la información del stacking AA que consideraremos más adelante. Dicho esto, podemos considerar el siguiente ansatz para el j -ésimo spinor asociado a este espacio de Hilbert:

$$|\Psi_j\rangle := \begin{cases} e^{iqj} |A\rangle + e^{-iqj} |B\rangle, & j \leq -1 \\ e^{iqj} |C\rangle + e^{-iqj} |D\rangle, & j \in [0, N+1] \\ e^{iqj} |E\rangle, & j \geq N+2 \end{cases} \quad (9.3)$$

En donde hemos considerado que la posición de los resonadores es $j = 0$ y $j = N + 1$, respectivamente, en términos de celdas unitarias. Además, los coeficientes son **vectoriales** dada la estructura intracelda que tiene el sistema de análisis. Notemos que este spinor $|\Psi_j\rangle$ es elemento de una **base** para el espacio de Hilbert del sistema inferior, por lo que se cumple:

$$\hat{H}_{\text{inf}} |\Psi\rangle = \sum_{q \in \text{BZ}} E_q |\Psi_q\rangle \quad (9.4)$$

En donde $|\Psi_q\rangle$ es la q -ésima base de proyección hacia el espacio de momento longitudinal para el spinor $|\Psi\rangle$. Ahora, para describir estados que no tengan incidencia en el continuo, forzamos su confinamiento considerando $|A\rangle \equiv |B\rangle \equiv |E\rangle \equiv |0\rangle$. Esto nos dice que el estado está efectivamente confinado en la zona central. Luego, si trabajamos las ecuaciones de Schrödinger para el spinor definido en las celdas que contienen a los resonadores, obtenemos:

$$\begin{cases} (E_q - \hat{H}_0 - \hat{V} e^{iq}) |C\rangle + (E_q - \hat{H}_0 - \hat{V} e^{-iq}) |D\rangle = \hat{V}' |\Phi_L\rangle \\ e^{iq(N+1)} (E_q - \hat{H}_0 - \hat{V}^\dagger e^{-iq}) |C\rangle + e^{-iq(N+1)} (E_q - \hat{H}_0 - \hat{V}^\dagger e^{iq}) |D\rangle = \hat{V}' |\Phi_R\rangle \end{cases} \quad (9.5)$$

En donde $|\Phi_{L/R}\rangle$ es el spinor que contiene la información del flake superior respectivo. Luego, podemos imponer la ecuación de Schrödinger para estos flakes, obteniéndose:

$$\begin{cases} |\Phi_L\rangle = (E - \hat{H}_0)^{-1} \hat{V}'^\dagger (|C\rangle + |D\rangle) \\ |\Phi_R\rangle = (E - \hat{H}_0)^{-1} \hat{V}'^\dagger (e^{iq(N+1)} |C\rangle + e^{-iq(N+1)} |D\rangle) \end{cases} \quad (9.6)$$

Y luego, tras reemplazar esto en (9.5), obtenemos el siguiente sistema:

$$\begin{cases} (E_q - \hat{H}_0 - \hat{\Sigma}_f - \hat{V}e^{iq}) |C\rangle + (E_q - \hat{H}_0 - \hat{\Sigma}_f - \hat{V}e^{-iq}) |D\rangle = |0\rangle \\ (E_q - \hat{H}_0 - \hat{\Sigma}_f - \hat{V}^\dagger e^{-iq}) |C\rangle + e^{-2iq(N+1)}(E_q - \hat{H}_0 - \hat{\Sigma}_f - \hat{V}^\dagger e^{iq}) |D\rangle = |0\rangle \end{cases} \quad (9.7)$$

En donde definimos $\hat{\Sigma}_f := \hat{V}'(E - \hat{H}_0)^{-1}\hat{V}'^\dagger$ como la **self-energy** asociada al efecto del flake sobre la parte inferior de esta celda. La condición para evitar el spinor trivial se reduce a lo siguiente:

$$\det(e^{-2iq(N+1)}\hat{M}_{22} - \hat{M}_{21}\hat{M}_{11}^{-1}\hat{M}_{12}) = 0 \quad (9.8)$$

En donde hemos definido:

$$[\hat{\mathbf{M}}] \equiv \begin{pmatrix} \hat{M}_{11} & \hat{M}_{12} \\ \hat{M}_{21} & \hat{M}_{22} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} E_q - \hat{H}_0 - \hat{\Sigma}_f - \hat{V}e^{iq} & E_q - \hat{H}_0 - \hat{\Sigma}_f - \hat{V}e^{-iq} \\ E_q - \hat{H}_0 - \hat{\Sigma}_f - \hat{V}^\dagger e^{-iq} & E_q - \hat{H}_0 - \hat{\Sigma}_f - \hat{V}^\dagger e^{iq} \end{pmatrix} \quad (9.9)$$

Si observamos la expresión (9.8), los valores permitidos para q dependen fuertemente de la estructura intracelda del sistema. Sin embargo, podemos pensar en lo siguiente. Dado que hemos definido la **self-energy** $\hat{\Sigma}_f$, este término actúa como una corrección en ciertas celdas de la cadena lineal inferior con estructura intracelda, por lo que si imponemos el caso asintótico $\|\hat{\Sigma}_f\| \rightarrow \infty$, podemos interpretar esto como que la acción de los flakes superiores es la de **paredes rígidas** sobre el continuo, lo que sería el **mecanismo de confinamiento** que hace que este spinor que describimos anteriormente **no** tenga radiación hacia el continuo. Para que esto se cumpla, podemos notar lo siguiente:

$$\hat{\Sigma}_f := \hat{V}'\hat{g}_f\hat{V}'^\dagger \quad (9.10)$$

En donde definimos la función de green $\hat{g}_f := (E - \hat{H}_0)^{-1}$. Si reescribimos esta función de Green en su forma espectral, considerando \mathcal{H}_0 como el espacio de Hilbert asociado al hamiltoniano \hat{H}_0 y $\mathcal{B} := \{|\psi_{\mathbf{R}}\rangle\}_{\mathbf{R}} \leq \mathcal{H}_0$ como base, entonces:

$$\hat{\Sigma}_f = \sum_{\mathbf{R} \in \text{intra}} \frac{\hat{A}_{\mathbf{R}}}{E - E_{\mathbf{R}}} \quad (9.11)$$

En donde definimos $\hat{A}_{\mathbf{R}} := \hat{V}'|\psi_{\mathbf{R}}\rangle\langle\psi_{\mathbf{R}}|\hat{V}'^\dagger$ y usamos la convención de que $|\psi_{\mathbf{R}}\rangle$ sea la \mathbf{R} -ésima componente vectorial intracelda del spinor total $|\Psi\rangle$. Con esto en mente, podemos analizar el caso asintótico imponiendo $E \rightarrow E_{\mathbf{R}_0}$, para algún \mathbf{R}_0 , lo que nos da la siguiente estructura:

$$\hat{\Sigma}_f = \frac{\hat{A}_{\mathbf{R}_0}}{E - E_{\mathbf{R}_0}} + \hat{\Sigma}_{\text{reg}} \quad (9.12)$$

En donde $\hat{\Sigma}_{\text{reg}}$ es un operador **regular** (i.e. sin singularidades). Esto es posible aún cuando existen degeneraciones. En ese caso, el operador $\hat{A}_{\mathbf{R}_0}$ se descompone en suma según los proyectores hacia estos estados degenerados. La gracia de esto es que ahora tenemos la singularidad de manera explícita si consideramos el caso asintótico. Con esto en mente, podemos reescribir el superoperador $\hat{\mathbf{M}}$ de la siguiente manera:

$$[\hat{\mathbf{M}}] \equiv -\frac{\hat{A}_{\mathbf{R}_0}}{E - E_{\mathbf{R}_0}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} + \underbrace{\begin{pmatrix} E_q - \hat{H}_0 - \hat{\Sigma}_{\text{reg}} - \hat{V}e^{iq} & E_q - \hat{H}_0 - \hat{\Sigma}_{\text{reg}} - \hat{V}e^{-iq} \\ E_q - \hat{H}_0 - \hat{\Sigma}_{\text{reg}} - \hat{V}^\dagger e^{-iq} & E_q - \hat{H}_0 - \hat{\Sigma}_{\text{reg}} - \hat{V}^\dagger e^{iq} \end{pmatrix}}_{=: \hat{\mathbf{R}}} \quad (9.13)$$

Con esta forma para el superoperador $\hat{\mathbf{M}}$, podemos reemplazar los términos para la condición presente en (9.8), obteniendo:

$$\det \left[e^{-2iq(N+1)} \left(\hat{R}_{22} - \frac{\hat{A}_{\mathbf{R}_0}}{E - E_{\mathbf{R}_0}} \right) - \hat{F} \right] = 0 \quad (9.14)$$

En donde definimos:

$$\hat{F} := \underbrace{\left(\hat{R}_{21} - \frac{\hat{A}_{\mathbf{R}_0}}{E - E_{\mathbf{R}_0}} \right)}_{\hat{M}_{21}} \underbrace{\left(\hat{R}_{11} - \frac{\hat{A}_{\mathbf{R}_0}}{E - E_{\mathbf{R}_0}} \right)^{-1}}_{\hat{M}_{11}^{-1}} \underbrace{\left(\hat{R}_{12} - \frac{\hat{A}_{\mathbf{R}_0}}{E - E_{\mathbf{R}_0}} \right)}_{\hat{M}_{12}} \quad (9.15)$$

Ahora, nos gustaría obtener alguna reducción para \hat{F} , con el objetivo de llegar a una condición analítica. En este caso, podemos explotar la imposición de que analizamos el caso asintótico de la siguiente manera. Consideremos que el espacio de Hilbert total del sistema lo descomponemos de la siguiente manera:

$$\mathcal{H}_0 = \text{Im}(\hat{A}_{\mathbf{R}_0}) \oplus \ker(\hat{A}_{\mathbf{R}_0}) \quad (9.16)$$

Y, además, definimos los proyectores a los respectivos subespacios; \hat{P} para $\text{Im}(\hat{A}_{\mathbf{R}_0})$ y $\hat{Q} := \hat{\mathbb{1}} - \hat{P}$. Con esto, podemos reescribir \hat{M}_{11} de la siguiente manera:

$$[\hat{M}_{11}] \equiv \begin{pmatrix} -\frac{\hat{A}_{\mathbf{R}_0}}{E - E_{\mathbf{R}_0}} + \hat{R}_{PP} & \hat{R}_{PQ} \\ \hat{R}_{QP} & \hat{R}_{QQ} \end{pmatrix} \quad (9.17)$$

En donde definimos $\hat{R} := E_q - \hat{H}_0 - \hat{\Sigma}_{\text{reg}} - \hat{V}e^{iq}$, y usamos la convención de notación $\hat{R}_{PQ} := \hat{P}\hat{R}\hat{Q}$. Dada la estructura tipo matriz por bloques, podemos invertirla fácilmente usando la fórmula de inversa por bloques de Schur:

$$[\hat{M}_{11}^{-1}] \equiv \begin{pmatrix} \hat{S}^{-1} & -\hat{S}^{-1}\hat{R}_{PQ}\hat{R}_{QQ}^{-1} \\ -\hat{R}_{QQ}^{-1}\hat{R}_{QP}\hat{S}^{-1} & \hat{R}_{QQ}^{-1} + \hat{R}_{QQ}^{-1}\hat{R}_{QP}\hat{S}^{-1}\hat{R}_{PQ}\hat{R}_{QQ}^{-1} \end{pmatrix} \quad (9.18)$$

En donde \hat{S} se define como el complemento de Schur de \hat{R}_{QQ} según:

$$\hat{S} := -\frac{\hat{A}_{\mathbf{R}_0}}{E - E_{\mathbf{R}_0}} \left(\hat{\mathbb{1}} - (E - E_{\mathbf{R}_0})\hat{A}_{\mathbf{R}_0}^{-1}(\hat{R}_{PP} - \hat{R}_{PQ}\hat{R}_{QQ}^{-1}\hat{R}_{QP}) \right) \quad (9.19)$$

Ahora bien, como el factor $E - E_{\mathbf{R}_0}$ es pequeño, podemos expandir polinómicamente la inversa de este operador en términos de este parámetro infinitesimal. De esto se obtiene:

$$\hat{S}^{-1} = -(E - E_{\mathbf{R}_0})\hat{A}_{\mathbf{R}_0}^{-1} - (E - E_{\mathbf{R}_0})^2(\hat{A}_{\mathbf{R}_0}^{-1})^2(\hat{R}_{PP} - \hat{R}_{PQ}\hat{R}_{QQ}^{-1}\hat{R}_{QP}) + \mathcal{O}_{\text{sup}}((E - E_{\mathbf{R}_0})^3) \quad (9.20)$$

Con esto, podemos escribir \hat{M}_{11}^{-1} y obtener la expansión de \hat{F} :

$$\hat{F} = -\frac{\hat{A}_{\mathbf{R}_0}}{E - E_{\mathbf{R}_0}} + \hat{F}_0 + \hat{\mathcal{O}}_{\text{sup}}(E - E_{\mathbf{R}_0}) \quad (9.21)$$

Considerando:

$$\begin{cases} \hat{F}_0 = \hat{A}_{\mathbf{R}_0}\hat{A}_{\mathbf{R}_0}^+\hat{R}_{12} + \hat{R}_{21}\hat{A}_{\mathbf{R}_0}^+\hat{A}_{\mathbf{R}_0} + \hat{R}_{21}\hat{B}_0\hat{R}_{12} \\ \hat{B}_0 := \hat{Q}\hat{R}_{QQ}^{-1}\hat{Q} \end{cases} \quad (9.22)$$

En donde se define la **pseudoinversa** del operador $\hat{A}_{\mathbf{R}_0}$ según:

$$\hat{A}_{\mathbf{R}_0}^{-1} = \hat{P}\hat{A}_{\mathbf{R}_0}^+\hat{P} \quad (9.23)$$

Finalmente, tras reemplazar \hat{F} en (9.14), obtenemos:

$$\det \left[-\frac{\hat{A}_{\mathbf{R}_0}}{E - E_{\mathbf{R}_0}}(e^{-2iq(N+1)} - 1) + (e^{-2iq(N+1)}\hat{R}_{22} - \hat{F}_0) + \hat{\mathcal{O}}_{\text{sup}}(E - E_{\mathbf{R}_0}) \right] = 0 \quad (9.24)$$

Por lo que, en el caso asintótico $E \rightarrow E_{\mathbf{R}_0}$, existen soluciones sí y solo sí:

$$q = \frac{m\pi}{N+1}, \quad m \in \mathbb{Z} \quad (9.25)$$

De esto interpretamos que si nuestro sistema admite la configuración de pared rígida, considerando que exista una banda permitida en el sistema para esto, entonces demostramos la existencia de candidatos a BICs generados por este mecanismo de atrapamiento. Es decir, la condición geométrica para que el sistema admita este tipo de estados se reduce a:

$$\exists m \in \mathbb{Z} : E_{q_m} = E_{\mathbf{R}_0}, \quad q_m := \frac{m\pi}{N+1} \quad (9.26)$$

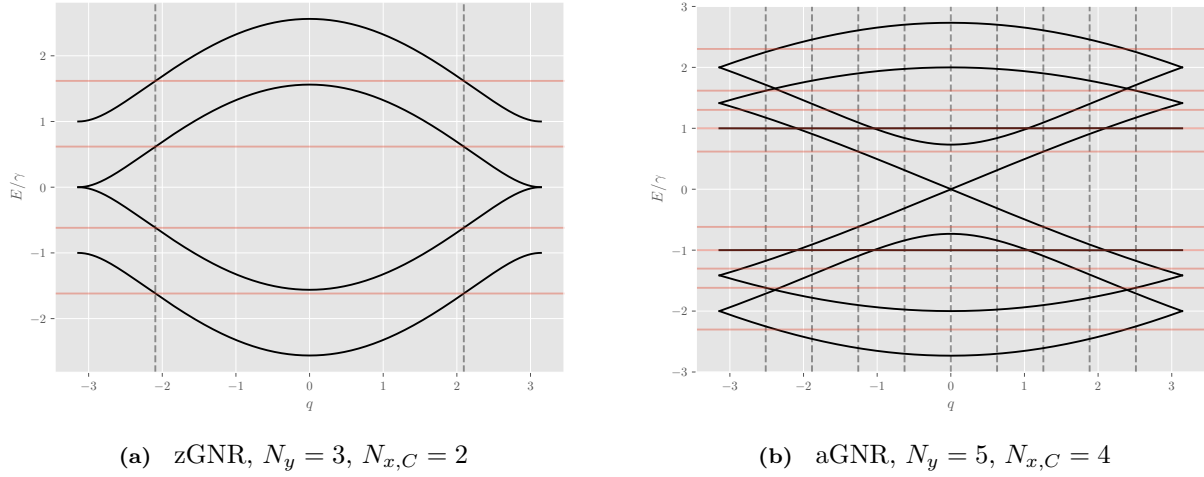


Figura 39: Esquema de la condición de existencia de BICs en homoestructuras de grafeno con distintas terminaciones. En este caso, consideramos $N_{x,Bi} = 1$ para ambos casos. Las líneas negras son las bandas de la nanocinta prístina y la rojas son los autovalores de los flakes superiores. Por otro lado, las líneas verticales punteadas son los valores de q que cumplen con la condición para alguna autoenergía de los flakes

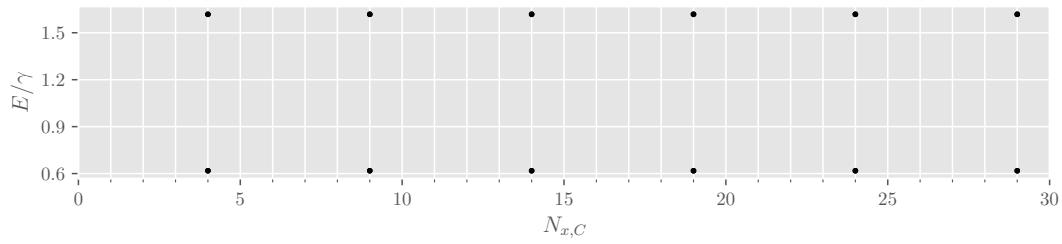
En donde hemos separado efectivamente la contribución de la estructura intracelda del efecto Fabry-Pérot, por lo cual la dependencia con la terminación del sistema entra justamente en el criterio de existencia de un estado como este en alguna banda del propio sistema, tal como se ve en la Figura 39. En este caso, vemos que si alguna autoenergía se puede modelar como la evaluación de alguna banda en un punto q que cumpla con la condición presente en (9.26), entonces se tiene un BIC en esa energía, con esa configuración en particular. Sin embargo, debido a la estructura intracelda, veremos que existen fenómenos ligados a las estructuras bilayer previamente analizadas, las cuales introducen un corrimiento de las energías en torno a las singularidades de Van Hove y el estado de borde en el caso zGNR. Esto implica que ciertos candidatos a BIC sean efectivamente **cuasi-BICs**, debido al desfase entre el estado de la banda y el autoestado del flake introducido por este corrimiento. Veremos a continuación las propiedades de transporte de estos sistemas para ver como se manifiestan estos estados, y en particular, que sucede con los casos en donde la condición **no** se cumple, pero por un margen pequeño.

9.2. Terminación *armchair*

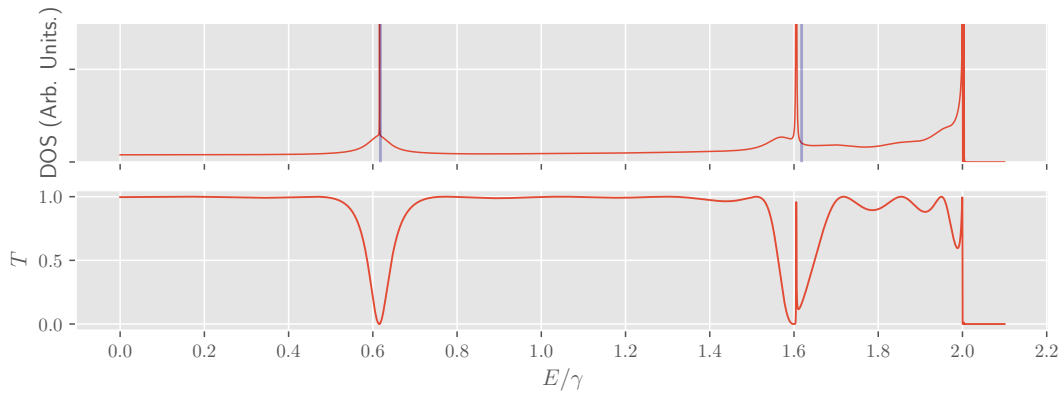
Primeramente, analizaremos el sistema con terminación *armchair*. Para esto, primeramente buscamos configuraciones las cuales admitan estos candidatos a BIC. Esto, forzando la condición presente en (9.26), obteniendo así los valores de $N_{x,C}$, según el esquema presente en la Figura 37. Primeramente, analizamos el sistema minimal, con $N_y = 2$, para ver el efecto de la estructura Fabry-Pérot sobre un canal armchair. Observando la Figura 40, notamos que existe un patrón establecido para la generación de BICs en el primer canal radiativo, en donde se obtiene una condición para el largo longitudinal central $N_{x,C}$ para la generación de estos estados candidatos a BIC, según:

$$N_{x,C} \stackrel{!}{=} 5r + 4 \quad , \quad r \in \mathbb{N}_0 \quad (9.27)$$

Sin embargo, si observamos el panel superior de la Figura 40, vemos que para estos $N_{x,C}$ existen dos candidatos; uno en $E \approx 0,6\gamma$ y otro en $E \approx 1,6\gamma$, pero observando el panel inferior, vemos que aparece un BIC solo en el primer caso, mientras que en el segundo se ve el perfil típico de un **cuasi-BIC**. Esto se debe justamente al corrimiento inducido desde el desdoblamiento del estado de Van Hove en el borde de la banda debido a las estructuras bilayer que forman parte del sistema total, resultando en un corrimiento efectivo para el estado candidato a BIC, lo que hace que la condición **no** se cumpla para esta energía por un margen pequeño. Desde esto decimos que para esta energía, el estado oscuro que proviene del armónico asintótico del fenómeno Fabry-Pérot tiene una pequeña componente en el subespacio subradiante, por lo que ahora este estado transmite de manera perfecta, obteniéndose el agudo perfil Fano que se observa en $E \approx 1,6\gamma$.



(a) Candidatos a BIC para un sistema aGNR con $N_y = 2$ y $N_{x,Bi} = 1$



(b) $T(E)$ y $DOS(E)$, $N_y = 2$, $N_{x,Bi} = 1$, $N_{x,C} = 4$. Las líneas azules corresponden a los autovalores degenerados de los flakes superiores

Figura 40: Resultados numéricos para la homoestructura Fabry-Pérot con terminación *armchair*, considerando $N_y = 2$ y $N_{x,Bi} = 1$

Por otro lado, podemos analizar la distribución espacial de este estado ligado en el continuo observando la **densidad local de estados**, tal como se muestra en la Figura 41. Notando que este estado no transmite en absoluto, podemos interpretar que los flakes superiores funcionan como **paredes rígidas**, concentrándose gran parte de la densidad de estados del sistema en estas estructuras, mientras que el estado estacionario en el monolayer inferior se distribuye de la forma presente debido a este confinamiento.

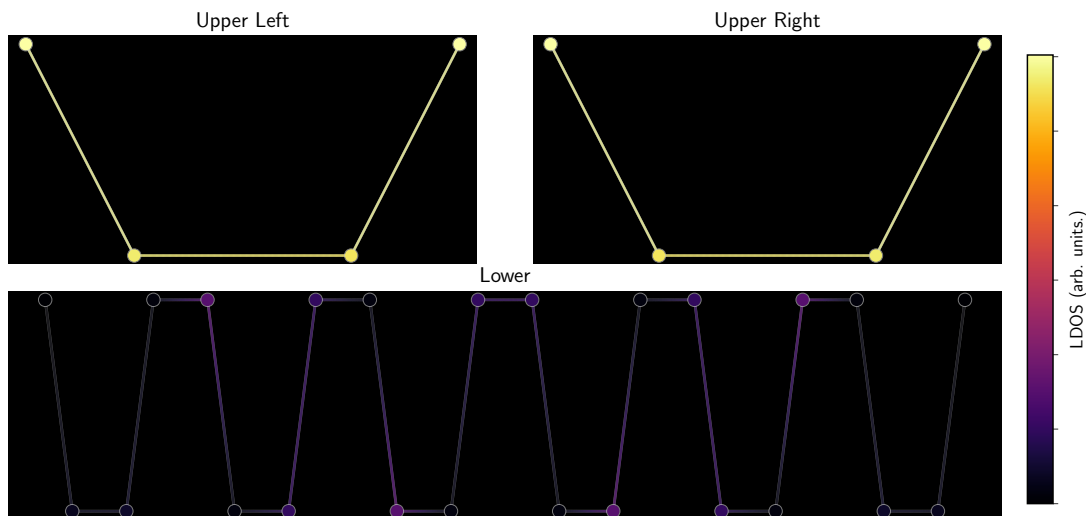
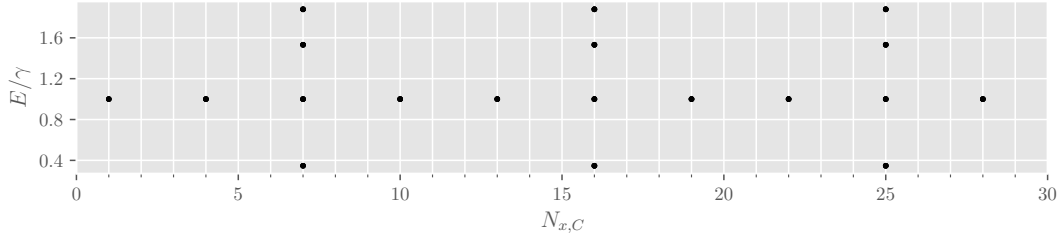
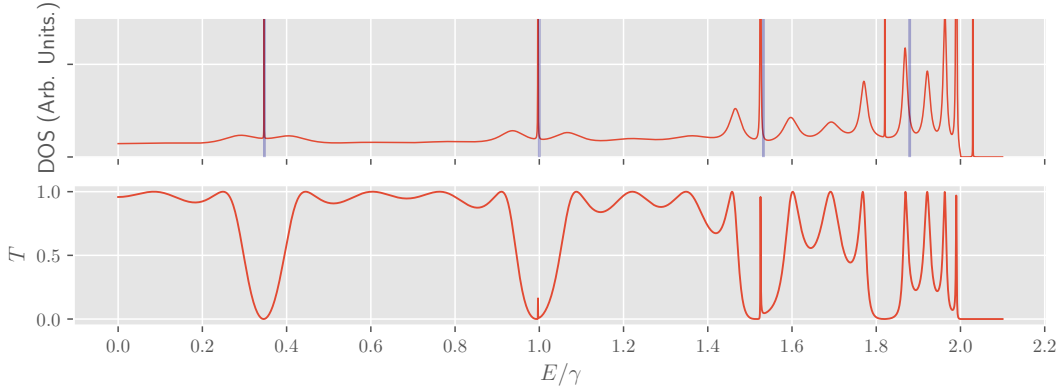
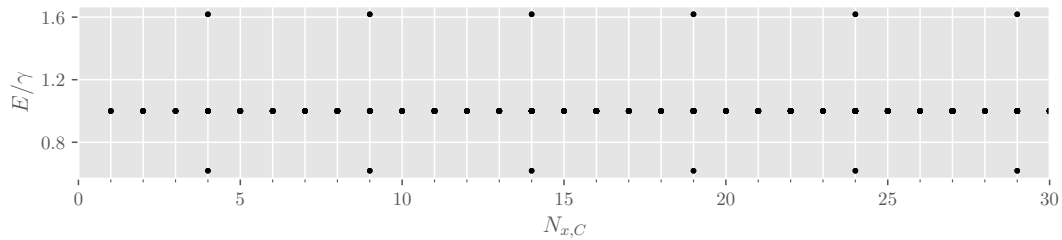


Figura 41: LDOS($E \approx 0,616\gamma$) para una homoestructura Fabry-Pérot con terminación *armchair*, considerando $N_y = 2$, $N_{x,C} = 4$ y $N_{x,Bi} = 1$

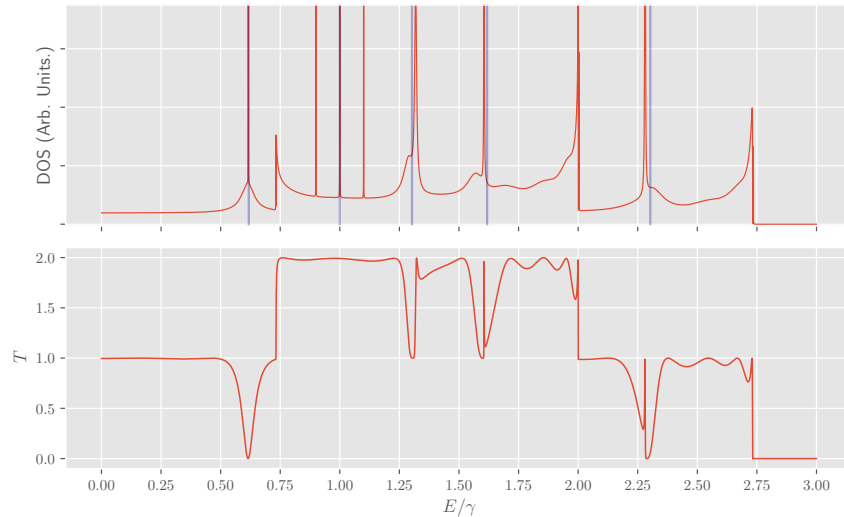
(a) Candidatos a BIC para un sistema aGNR con $N_y = 2$ y $N_{x,Bi} = 2$ (b) $T(E)$ y $DOS(E)$, $N_y = 2$, $N_{x,Bi} = 2$, $N_{x,C} = 7$. Las líneas azules corresponden a los autovalores degenerados de los flakes superiores**Figura 42:** Resultados numéricos para la homoestructura Fabry-Pérot con terminación *armchair*, considerando $N_y = 2$ y $N_{x,Bi} = 2$

Ahora, podemos ver el efecto que se tiene en el sistema tras variar el largo longitudinal de los flakes, a saber, $N_{x,Bi}$. Si observamos la Figura 42, para el caso $N_{x,Bi} = 2$, con $N_{x,C} = 7$, tenemos 4 posibles candidatos a BIC, en donde dos de estos son efectivamente BICs, mientras que los otros dos tienen radiación hacia el continuo. Esto, debido al mismo mecanismo que explicamos anteriormente. Es más, si observamos el BIC presente en $E \approx 1,8\gamma$, este sufre un corrimiento distinto en comparación a los otros estados. Esta es la clara manifestación de dos mecanismos completamente aislados uno del otro. En primera instancia, la generación de candidatos a BIC es un **fenómeno geométrico** del sistema **total**, mientras que el corrimiento de estados debido al desdoblamiento de los bordes de cada banda es otro **fenómeno geométrico**, pero de la subestructura **bilayer**. Esto es explicado en la sección del sistema bilayer, en donde establecimos que este fenómeno de corrimiento viene dado transversalmente para cada terminación, por lo que en total tenemos dos mecanismos que, al interferir entre ellos, tenemos la formación de BICs o no. Esta manera de atacar el problema es bastante útil, dado que con esto podemos revisar las configuraciones que tienen estos estados candidatos, y luego podemos simular estos sistemas en particular para corroborar la existencia de BICs. El análisis total del sistema, en donde tendríamos una forma explícita de cómo sería la mezcla de estas interacciones, quedará como una propuesta de trabajo a futuro, debido a la alta complejidad en el sentido de la correlación de los parámetros disponibles a manipular. Sin embargo, hemos podido desarrollar una herramienta sencilla la cual nos permite predecir estados que podrían cumplir con la condición predispuesta en (9.26), dependiendo de los efectos de las subestructuras del sistema.

Ahora que entendemos a cabalidad la acción de esta homoestructura sobre el primer modo dispersivo con terminación *armchair*, podemos ir al primer caso minimal en donde la terminación tiene una incidencia sobre los resultados numéricos, tal como pasa en el caso bilayer aislado. Para esto, analizaremos una homoestructura Fabry-Pérot con terminación *armchair*, considerando $N_y = 5$, lo que sería una cinta metálica de dos modos dispersivos. De la misma manera, analizamos primeramente cuales son los estados candidatos a BIC mediante la imposición de la condición (9.26), considerando ahora la elección de celda unitaria pertinente. Desde esto, se obtienen los resultados que se muestran en la Figura 43. En este caso,



(a) Candidatos a BIC para un sistema aGNR con $N_y = 5$ y $N_{x, \text{Bi}} = 1$



(b) $T(E)$ y $\text{DOS}(E)$, $N_y = 5$, $N_{x, \text{Bi}} = 1$, $N_{x, C} = 4$. Las líneas azules corresponden a los autovalores degenerados de los flakes superiores

Figura 43: Resultados numéricos para la homoestructura Fabry-Pérot con terminación *armchair*, considerando $N_y = 5$ y $N_{x, \text{Bi}} = 1$

para el subcaso minimal $N_{x, \text{Bi}} = 1$, notamos que existen candidatos según el mismo patrón para el caso de un modo propagante, en particular según (9.27). Además, existen candidatos para todos los largos longitudinales centrales en $E = \gamma$. Esto es esperable, dado que existe una banda plana en la nanocinta con esta configuración $N_y = 5$, y justamente existen autoestados degenerados en estos flakes los cuales tienen exactamente esta energía. Sin embargo, al analizar el panel inferior de la Figura 43, notamos que existe un BIC únicamente en $E \approx 0,6\gamma$. En las demás energías ocurre el mismo fenómeno de corrimiento inducido por la deriva del estado desdoblado desde alguna singularidad de Van Hove. Por otro lado, tenemos el estado en $E = \gamma$, el cual no tiene firma en la transmitancia. La razón de esto es algo que mencionamos en la sección de la nanocinta aislada; existe un modo transversal el cual cancela el acoplamiento intercelda en la representación modal de esta estructura, lo que implica una desconexión efectiva con el continuo, por lo que no habría incidencia alguna en la transmitancia. Esto se manifiesta como una banda plana en la relación de dispersión, y es gracias a esto que tenemos siempre este estado, independiente del largo central, dado que la condición siempre se cumple. En otras palabras, para todo $q \in \text{BZ}$, la energía de la banda plana es justamente un autovalor del flake. Por último, observamos los mismos peaks tipo delta en $E = \gamma \pm \gamma'$, los cuales se deben a la estructura bonding/antibonding provenientes de las zonas bilayer.

De igual forma que en el caso unimodal, procedemos a computar la **densidad local de estados** para el estado ligado en el continuo en $E \approx 0,6\gamma$. Esto se muestra en la Figura 44, en donde se manifiesta nuevamente el efecto de **paredes rígidas** en el sistema, notando que existe una concentración electrónica considerable en los flakes superiores, debido justamente a este fenómeno.

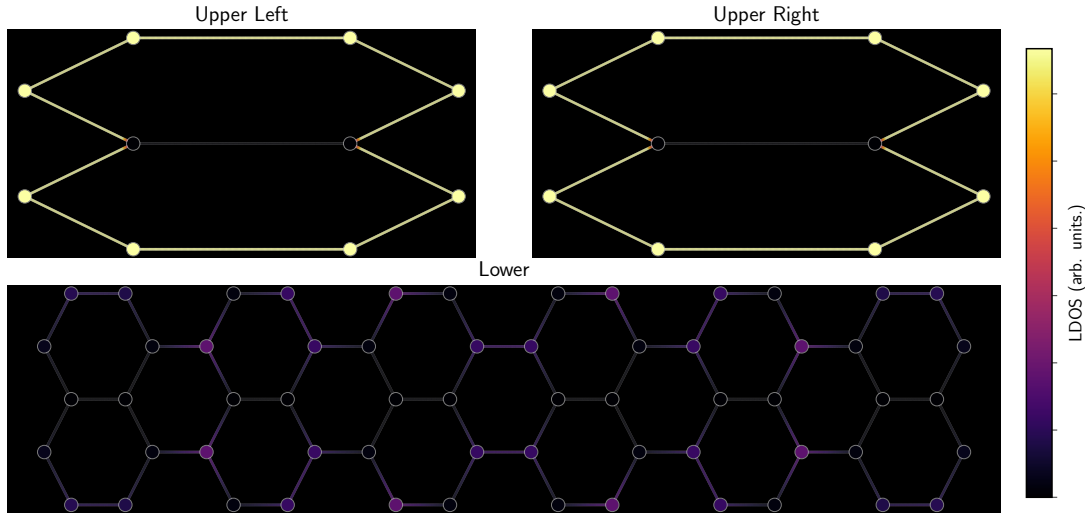


Figura 44: LDOS($E \approx 0,615\gamma$) para una homoestructura Fabry-Pérot con terminación *armchair*, considerando $N_y = 5$, $N_{x,C} = 4$ y $N_{x,Bi} = 1$

9.3. Terminación *zigzag*

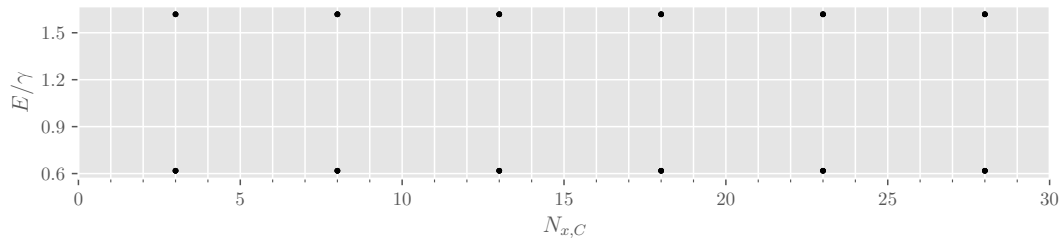
A continuación analizaremos la homoestructura Fabry-Pérot propuesta con una terminación tipo *zigzag*. Dado que el comportamiento general de este tipo de estructuras es independiente de la estructura intracelda, esperamos ver confinamiento de estados debido a la geometría propia del sistema, y efectos de corrimiento de estados por la incidencia de las zonas bilayer. Primeramente, computamos numéricamente los casos en donde se cumple la condición presente en (9.26), seleccionando los estados candidatos a BIC, y luego procedemos a calcular las propiedades de transporte en esta configuración para así poder corroborar cuál de estos estados es efectivamente un BIC, dependiendo de los efectos de interferencia independientes presentes en el sistema como tal. En primera instancia, analizaremos el caso minimal $N_y = 2$, en donde consideramos una estructura tipo cadena diatómica lineal para la estructura inferior. Dado lo establecido previamente en la sección en donde analizamos el sistema bilayer con esta terminación, esta configuración es homóloga a la configuración con $N_y = 2$ para la terminación *armchair*, sin embargo existen diferencias entre estas dos configuraciones homólogas como veremos a continuación.

Los resultados numéricos para esta configuración homóloga se muestran en la Figura 45, en donde vemos que la distribución de estados candidatos a BICs siguen el patrón:

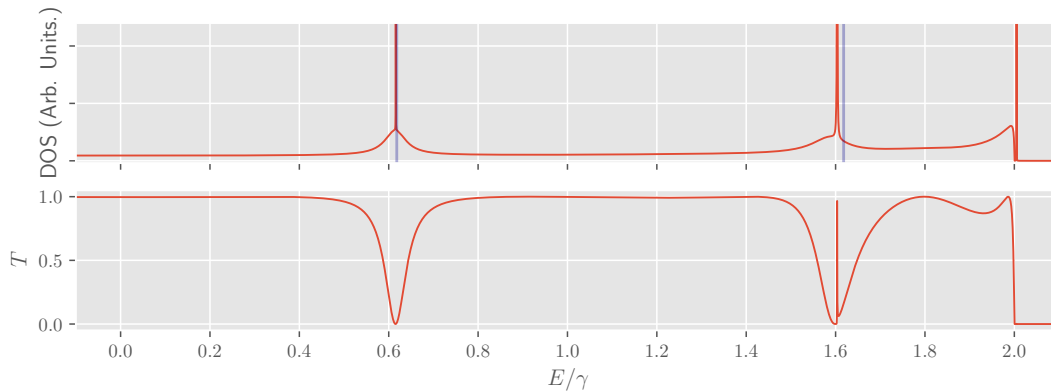
$$N_{x,C} = 5r + 3 \quad , \quad r \in \mathbb{N}_0 \quad (9.28)$$

En donde existe una diferencia con respecto a la condición para la configuración homóloga en la otra terminación, particularmente (9.27), en donde la **frecuencia** de aparición de estados candidatos es la misma, pero el factor de fase difiere. Esto se debe principalmente a la diferencia en la definición de celda unitaria entre terminaciones, tal como vimos anteriormente. Ahora, si fijamos alguna configuración que admita estos estados candidatos, obtenemos las propiedades de transporte que figuran en el panel inferior de la Figura 45, en donde vemos el mismo comportamiento que en el caso homólogo con terminación *armchair*. Sin embargo, las fluctuaciones tanto en densidad de estados como en transmitancia al final de la banda son distintas entre la presente y la del caso homólogo, presente en la Figura 40. Esto se debe a que estos estados resonantes son soluciones triviales a la ecuación general (9.8); consideramos el complemento del espacio de soluciones para q para las cuales **no** hay correspondencia con una autoenergía de los flakes superiores. Estas soluciones **sí** dependen de la estructura intracelda, y dada la diferencia en la definición para cada terminación, la frecuencia Fabry-Pérot es distinta. Sin embargo, al notar que los candidatos a BIC están a la misma energía, y con el mismo patrón de que en $E \approx 0,6\gamma$ existe efectivamente un BIC, mientras que en $E \approx 1,6\gamma$ se forma un cuasi-BIC, se confirma que este confinamiento se debe neta y exclusivamente al arreglo geométrico el cual formamos con microestructuras diferentes entre sí.

Con esto en mente, podemos pasar a analizar la configuración que considera dos modos propagantes, tal como hicimos con la terminación previa. Para esto, consideramos $N_y = 3$ y computamos numéricamente los candidatos a BICs para diversos largos longitudinales de los flakes superiores $N_{x,Bi}$. Primeramente,



(a) Candidatos a BIC para un sistema zGNR con $N_y = 2$ y $N_{x,Bi} = 2$



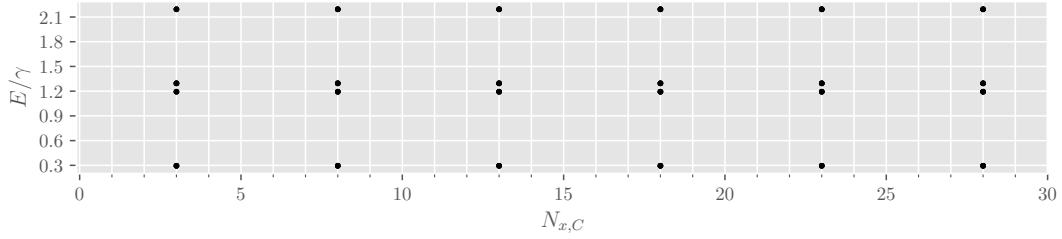
(b) $T(E)$ y $DOS(E)$, $N_y = 2$, $N_{x,Bi} = 2$, $N_{x,C} = 3$. Las líneas azules corresponden a los autovalores degenerados de los flakes superiores

Figura 45: Resultados numéricos para la homoestructura Fabry-Pérot con terminación *zigzag*, considerando $N_y = 2$ y $N_{x,Bi} = 2$

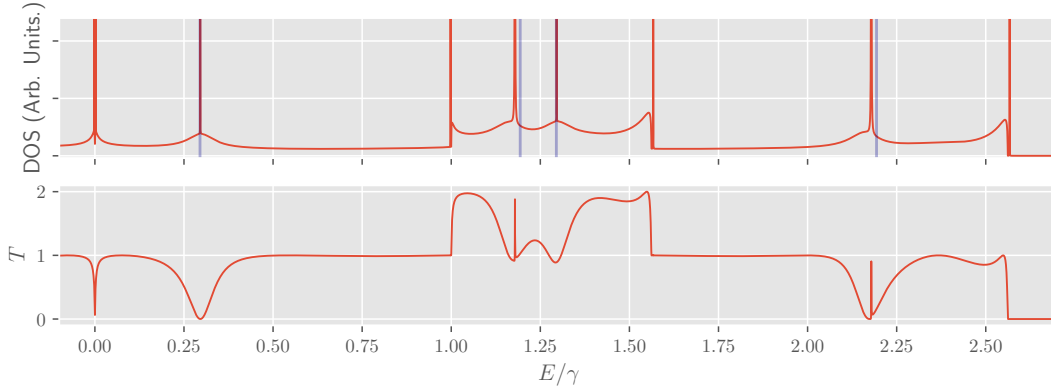
consideramos el caso $N_{x,Bi} = 2$, en donde los resultados numéricos para esta configuración en específico se muestran en la Figura 46. En este caso, notamos que la regla de aparición de candidatos a BIC es equivalente para el caso con $N_y = 1$. Sin embargo, la **cantidad** de candidatos varía. Esto se debe a más libertad debido al modo propagante extra que se está considerando en este caso. Al situarnos en alguna configuración que admita este tipo de estados candidatos, observamos que, de los cuatro estados que son candidatos, solo dos de ellos son BICs, mientras que los demás tienen perfil de cuasi-BIC. Esto se debe, nuevamente al corrimiento inducido por el desdoblamiento de los estados tipo Van Hove. La forma en que estos estados se localizan en el espacio se muestra en la Figura 47, en donde seleccionamos el estado alrededor de $E \approx 0,3\gamma$, y computamos la densidad local de estados. De la misma manera que en los casos previos, observamos una localización mayoritaria en los flakes superiores, lo que nos vuelve a confirmar que existe este mecanismo de paredes rígidas en el sistema.

Por último, observamos que se destruye el estado de borde en $E = 0$, lo que es esperable, dado que la destrucción no proviene de la estructura geométrica actual, sino desde las estructuras bilayer. Establecimos previamente que existe una deriva para este estado hacia $E \rightarrow \gamma'$ a medida que aumenta el largo de esta zona bilayer de por sí, en donde se cumple que este estado queda situado en $E = \gamma'$ en el límite de flake infinito. Con esto en mente, podemos argumentar que, con esta configuración, no hay forma de obtener un estado de borde en la energía de Fermi, dado que la destrucción proviene de las interacciones intracelda que caracterizan este bilayer de terminación *zigzag*.

A continuación procedemos a terminar el análisis para esta terminación observando el comportamiento del sistema a medida que aumentamos el largo longitudinal de los flakes superiores. Para esto, consideramos el caso $N_{x,Bi} = 5$, y procedemos a computar numéricamente los candidatos a BICs, y posteriormente, corroborar la naturaleza de estos estados mediante la simulación de la configuración pertinente. Los resultados numéricos se presentan en la Figura 48, en donde vemos que, en esta configuración específica, se cumple la siguiente condición:



(a) Candidatos a BIC para un sistema zGNR con $N_y = 3$ y $N_{x,Bi} = 2$



(b) $T(E)$ y $DOS(E)$, $N_y = 3$, $N_{x,Bi} = 2$, $N_{x,C} = 3$. Las líneas azules corresponden a los autovalores degenerados de los flakes superiores

Figura 46: Resultados numéricos para la homoestructura Fabry-Pérot con terminación *zigzag*, considerando $N_y = 3$ y $N_{x,Bi} = 2$

$$N_{x,C} = 11r + 6 \quad , \quad r \in \mathbb{N}_0 \tag{9.29}$$

Si analizamos el panel inferior, podemos notar que existe un **espectro** de cuasi-BICS, los cuales algunos transmiten más que otro, dependiente del corrimiento que ha sufrido este estado debido al efecto de las zonas bilayer. En particular, podemos notar que **todos** estos candidatos transmiten, lo que implica lo siguiente. Al momento de considerar largos longitudinales $N_{x,Bi}$ cada vez mayores, el corrimiento es cada vez más presente a lo largo de la región energética descrita por las bandas dispersivas, por lo que la condición nunca se cumpliría, si no fuera por alguna configuración tal que la diferencia entre las energías

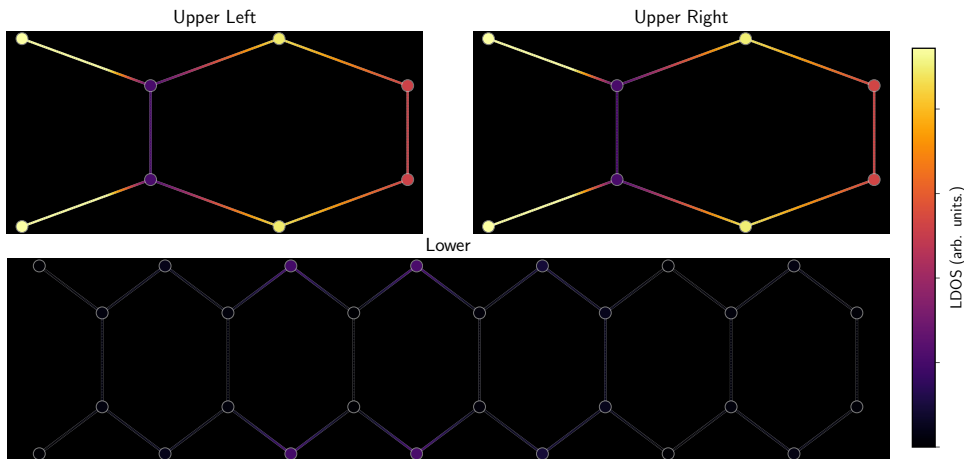
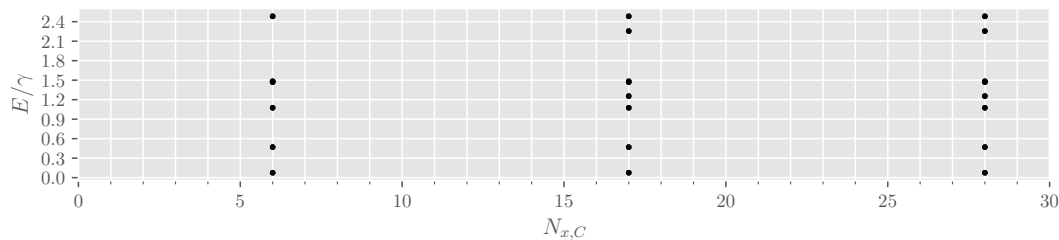
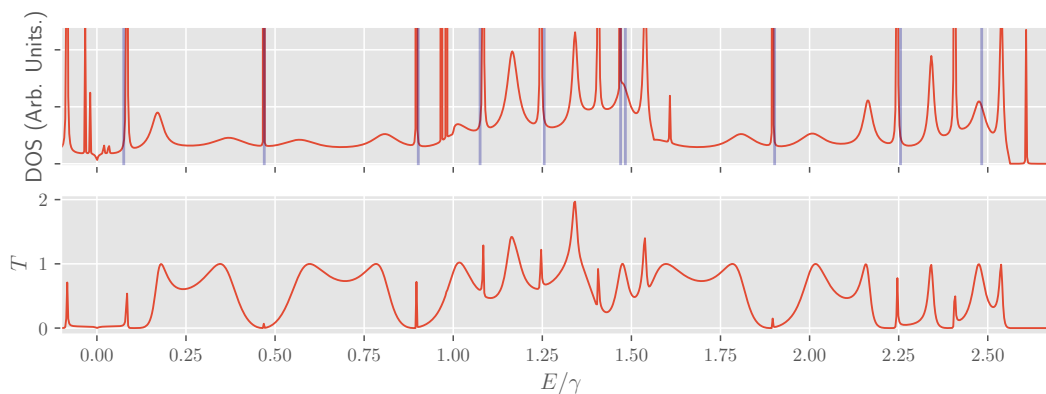


Figura 47: LDOS($E \approx 0,296\gamma$) para una homoestructura Fabry-Pérot con terminación *zigzag*, considerando $N_y = 3$, $N_{x,C} = 3$ y $N_{x,Bi} = 2$



(a) Candidatos a BIC para un sistema zGNR con $N_y = 3$ y $N_{x,Bi} = 5$



(b) $T(E)$ y $DOS(E)$, $N_y = 3$, $N_{x,Bi} = 2$, $N_{x,C} = 6$. Las líneas azules corresponden a los autovalores degenerados de los flakes superiores

Figura 48: Resultados numéricos para la homoestructura Fabry-Pérot con terminación *zigzag*, considerando $N_y = 3$ y $N_{x,Bi} = 5$

de dos antirresonancias aledañas impuestas por las zonas bilayer, en donde en una de ellas se cumple la condición Fabry-Pérot inicialmente, sea **exactamente** el corrimiento efectivo del estado candidato en esa dirección. Esto daría lugar a **BICs accidentales**, netamente dependiente de un ajuste fino de parámetros. Este estudio se propone como trabajo futuro, dado que nuevamente debemos conocer la forma en que se mezclan estos dos fenómenos independientes entre sí; el efecto de las zonas bilayer, y el fenómeno Fabry-Pérot.

10. Conclusiones

En este trabajo hemos desarrollado las herramientas para poder entender una utilización sencilla, pero moderna del grafeno a la hora de calcular propiedades de transporte de homoestructuras, tanto clásicas, como la propuestas para una plataforma en donde se puede forzar la aparición de BICs. En particular, se concluye con un entendimiento de las nanocintas prístinas en el contexto de transporte cuántico; mecanismos que se presentan transversalmente a lo largo de las homoestructuras de análisis, luego cómo interfieren estas capas de grafeno según un stacking en específico y por último la explotación de este fenómeno de interferencia para la posible formación de estados ligados en el continuo.

Concluimos que para la homoestructura Fabry-Pérot existe una clara dependencia con el largo de los flakes superiores y el corrimiento de los estados, lo cual induce una corrección a la energía del peak y es gracias a esto que se pierde el confinamiento total de los estados. En un límite realista actual, la creación de estos estados BIC serán mediante un mecanismo meramente accidental, el cual se compone de la mezcla del fenómeno de interferencia propio del bilayer (los corrimientos de los estados, debido a la deriva de los estados desdoblados desde alguna singularidad de Van Hove) y del fenómeno Fabry-Pérot. Sin embargo, se abre la propuesta para poder buscar homoestructuras que preserven el mecanismo Fabry-Pérot, pero que no induzcan un corrimiento, para que así exista una protección de estos estados ligados, debido a la independencia microscópica del fenómeno Fabry-Pérot.

Esto nos lleva a formalizar el trabajo a futuro que se propone. En particular, la principal limitación de este trabajo es justamente la mezcla de estas dos fuentes de interferencia, independientes entre sí, por lo que un análisis más exhaustivo de esta mezcla será necesaria para predecir la existencia de BICs accidentales. Por otro lado, sería interesante ver el efecto de distintos stackings a considerar para generar las homoestructuras propuestas en el trabajo, debido a su reportada diferencia en homoestructuras simples, como el bilayers de grafeno. Además, dado que en este trabajo no consideramos efectos de muchos cuerpos, no podemos ver la incidencia de esto en los resultados, lo que en primera aproximación es válido, según lo que se ha reportado previamente en la literatura. Finalmente, queda como propuesta de trabajo a futuro el analizar las propiedades termoeléctricas de la homoestructura Fabry-Pérot descrita, dado que como limitación de este proyecto, hemos considerado temperatura 0 en todos los sistemas.

A. Base no diagonal en k para aGNR

Para demostrar que la elección de celda unitaria que hicimos en la sección 7.1.1 **no** es diagonal en la base del momento transversal k , observemos que podemos forzar una transformada de Fourier para la dirección parametrizada por m , solo que ahora este nuevo momento transversal k **no** será continuo, sino que está regido por una condición que selecciona los modos permitidos en el material. Esto se da por las **condiciones de borde abiertas** que existen en el material. Para trabajar de igual forma en este espacio de momento cuantizado, podemos de igual manera expandir en una **serie de Fourier** los operadores de campo, y así imponer efectivamente las OBCs pertinentes. Para esto, supongamos la expansión en serie de la siguiente forma:

$$\hat{\sigma}_m = \sum_{k \in \text{BZ}} (A_k e^{ikm} + B_k e^{-ikm}) \hat{\sigma}_k \quad (\text{A.1})$$

A continuación, debemos encontrar los coeficientes A_k y B_k para obtener la forma cerrada de esta expansión y poder así reemplazar estos operadores de campo en el hamiltoniano m -dependiente. Refiriéndonos a la Figura 9, podemos ver que tanto para $m = 0$ como para $m = N_y + 1$ **no** existe localización posible de estados, lo cual se traduce en que **crear** una partícula en estos sitios no debería tener efecto sobre el vacío. Esto nos lleva a imponer las OBCs de la siguiente forma:

$$\hat{\sigma}_{m=0} \equiv \hat{\sigma}_{m=N_y+1} = \hat{0} \quad (\text{A.2})$$

Reemplazando la primera condición en (A.1) obtenemos:

$$A_k = -B_k \implies \hat{\sigma}_m = \sum_k C_k \sin(km) \hat{\sigma}_k \quad (\text{A.3})$$

Por otra parte, si imponemos la segunda condición en la expresión anterior para $\hat{\sigma}_m$, obtenemos:

$$\sin(k(N_y + 1)) = 0 \implies k = \frac{\pi s}{N_y + 1}, \quad s \in \{1, 2, \dots, N_y\} \quad (\text{A.4})$$

Finalmente, al normalizar la expresión resultante para $\hat{\sigma}_k$, obtenemos la forma cerrada de este operador de campo en su forma modal:

$$\hat{\sigma}_m = \sqrt{\frac{2}{N_y + 1}} \sum_{k \in \text{BZ}} \sin(km) \hat{\sigma}_k \quad (\text{A.5})$$

Aquí es útil detenerse un momento y analizar el resultado obtenido. El hecho de que la forma modal de este operador proyectado en la dirección transversal de la nanocinta tenga esta forma implica que la estructura modal efectiva a la cual llegamos es en efecto la de una **cadena**, en este caso compuesta de dímeros. Los extremos abiertos de esta nanocinta emulan perfectamente los extremos de una cadena trivial, por lo que ahora tenemos una visión general de cómo se compone esta estructura de grafeno en el espacio de momenta. Ahora estamos listos para reemplazar esta expresión en los hamiltonianos presentes en (7.3), obteniéndose:

$$\begin{cases} \hat{H}_0 = -\gamma(\hat{\mathcal{H}}_1 + \hat{\mathcal{H}}_2) \\ \hat{V} = -\gamma\hat{\mathcal{H}}_3 \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

En donde hemos definido:

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{\mathcal{H}}_1 = \sum_{k,k' \in \text{BZ}} \sum_{r=1}^{M(N_y)} \left[\frac{2}{N_y+1} [\sin(k'(2r-1)) \sin(k(2r-1))] \hat{a}_k^\dagger \hat{b}_k + \text{h.c.} \right] \\ \hat{\mathcal{H}}_2 = \sum_{k,k' \in \text{BZ}} \frac{2}{N_y+1} \sum_{m=1}^{N_y} \sin(k'm) \sin(km) \hat{a}_k^\dagger \hat{b}_k + \sin(k'm) \sin(k(m+1)) \hat{b}_m^\dagger \hat{a}_{m+1} + \text{h.c.} \\ \hat{\mathcal{H}}_3 = \sum_{k,k' \in \text{BZ}} \sum_{r=1}^{M(N_y)} \frac{2}{N_y+1} [\sin(k'(2r)) \sin(k(2r))] \hat{a}_k^\dagger \hat{b}_k \end{array} \right. \quad (\text{A.7})$$

y además, definimos:

$$M(N_y) = \begin{cases} \frac{N_y+1}{2}, & N_y \text{ impar} \\ \frac{N_y}{2}, & N_y \text{ par} \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

Desde esto vemos directamente que el hamiltoniano total \mathbf{no} es diagonal en la proyección transversal de la base de momenta. Es más, viendo explícitamente el término $\hat{\mathcal{H}}_1$, obtenemos:

$$\hat{\mathcal{H}}_1 = \frac{1}{4} \sum_{s,s'=1}^{N_y} \left(\frac{\sin\left(\frac{2M\pi}{N_y+1}(s'-s)\right)}{\sin\left(\frac{\pi(s'-s)}{N_y+1}\right)} - \frac{\sin\left(\frac{2M\pi}{N_y+1}(s'+s)\right)}{\sin\left(\frac{\pi(s'+s)}{N_y+1}\right)} \right) (\hat{a}_k^\dagger \hat{b}_k + \text{h.c.}) \quad (\text{A.9})$$

Fijémonos primero en el caso $k \neq k' \implies s \neq s'$. De aquí vemos automáticamente que si N_y es **impar**, entonces $\hat{\mathcal{H}}_1 = \hat{0}$. Sin embargo, en el caso N_y par, tenemos términos fuera de la diagonal, los cuales no se simplifican en general. Esto mismo ocurre para el resto de términos, en donde se exige una mezcla de modos transversales en esta base para generar los canales de dispersión del material. Esto, sin embargo, es evitable al momento de usar una base adecuada, tal como se expone en la sección 7.1.2.

Referencias

- [1] Hocine Boumrar et al. *Equivalence of wave function matching and Green's functions methods for quantum transport: generalized Fisher-Lee relation*. 2020. arXiv: 1912.11506 [cond-mat.mes-hall]. URL: <https://arxiv.org/abs/1912.11506>.
- [2] Natalia Cortés et al. "Bound states in the continuum: Localization of Dirac-like fermions". En: *EPL (Europhysics Letters)* 108.4 (nov. de 2014), pág. 46008. ISSN: 1286-4854. DOI: 10.1209/0295-5075/108/46008. URL: <http://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/108/46008>.
- [3] Supriyo Datta. *Quantum Transport: Atom to Transistor*. Cambridge: Cambridge University Press, 2005. ISBN: 9780521631457.
- [4] Hai-Yao Deng y Katsunori Wakabayashi. "Decomposition into propagating and evanescent modes of graphene ribbons". En: *Phys. Rev. B* 90 (4 jul. de 2014), pág. 045402. DOI: 10.1103/PhysRevB.90.045402. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.045402>.
- [5] Markus Fierz. "Über die relativistische Theorie frei loser Teilchen mit beliebigem Spin". En: *Helvetica Physica Acta* 12 (1939), págs. 3-37.
- [6] J. W. González et al. "Electronic transport through bilayer graphene flakes". En: *Physical Review B* 81.19 (mayo de 2010). ISSN: 1550-235X. DOI: 10.1103/physrevb.81.195406. URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.81.195406>.
- [7] Giuseppe Grosso y Giuseppe Pastori Parravicini. *Solid State Physics*. 2.^a ed. San Diego, CA: Academic Press (Elsevier), 2013. ISBN: 9780123850300. DOI: 10.1016/C2010-0-66724-1.
- [8] Chia Wei Hsu et al. "Bound states in the continuum". En: *Nature Reviews Materials* 1.9 (2016), pág. 16048. DOI: 10.1038/natrevmats.2016.48. URL: <https://www.nature.com/articles/natrevmats201648>.
- [9] J. M. Leinaas y J. Myrheim. "On the Theory of Identical Particles". En: *Il Nuovo Cimento B* 37.1 (1977), págs. 1-23. DOI: 10.1007/BF02727953.
- [10] Caio H. Lewenkopf y Eduardo R. Mucciolo. "The recursive Green's function method for graphene". En: *Journal of Computational Electronics* 12.2 (mayo de 2013), págs. 203-231. ISSN: 1572-8137. DOI: 10.1007/s10825-013-0458-7. URL: <http://dx.doi.org/10.1007/s10825-013-0458-7>.
- [11] Andrey E. Miroshnichenko, Sergej Flach y Yuri S. Kivshar. "Fano resonances in nanoscale structures". En: *Rev. Mod. Phys.* 82 (3 ago. de 2010), págs. 2257-2298. DOI: 10.1103/RevModPhys.82.2257. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.82.2257>.
- [12] K. S. Novoselov et al. "Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films". En: *Science* 306.5696 (2004), págs. 666-669. DOI: 10.1126/science.1102896.
- [13] A. Orlof, J. Ruseckas e I. V. Zozoulenko. "Effect of zigzag and armchair edges on the electronic transport in single-layer and bilayer graphene nanoribbons with defects". En: *Physical Review B* 88.12 (2013), pág. 125409. DOI: 10.1103/PhysRevB.88.125409.
- [14] Wolfgang Pauli. "The Connection Between Spin and Statistics". En: *Physical Review* 58 (1940), págs. 716-722.
- [15] Yamina Rezzouk et al. "Fabry-Pérot and Friedrich-Wintgen bound states in the continuum in a photonic triple-stub cavity". En: *Physical Review B* 109.23 (2024), pág. 235431. DOI: 10.1103/PhysRevB.109.235431.
- [16] J. J. Sakurai y Jim Napolitano. *Modern Quantum Mechanics. Revised and Expanded Third Edition*. 3rd. Cambridge University Press, 2020. ISBN: 978-1-108-64592-8. DOI: 10.1017/9781108587280.
- [17] M P Lopez Sancho et al. "Highly convergent schemes for the calculation of bulk and surface Green functions". En: *Journal of Physics F: Metal Physics* 15.4 (abr. de 1985), pág. 851. DOI: 10.1088/0305-4608/15/4/009. URL: <https://doi.org/10.1088/0305-4608/15/4/009>.
- [18] Katsunori Wakabayashi et al. "Electronic states of graphene nanoribbons and analytical solutions". En: *Science and Technology of Advanced Materials* 11.5 (2010), pág. 054504. DOI: 10.1088/1468-6996/11/5/054504.
- [19] Katsunori Wakabayashi et al. "Electronic transport properties of graphene nanoribbons". En: *New Journal of Physics* 11.9 (sep. de 2009), pág. 095016. ISSN: 1367-2630. DOI: 10.1088/1367-2630/11/9/095016. URL: <http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/11/9/095016>.

- [20] P. R. Wallace. “The Band Theory of Graphite”. En: *Phys. Rev.* 71 (9 mayo de 1947), págs. 622-634. DOI: 10.1103/PhysRev.71.622. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.71.622>.