
Transporte Cuántico en Grafeno: Interacción Dinámica de Intercambio y Estados Cuasi-unidimensionales Estacionarios

Simeón Moisés Yaro Medina



Bellaterra, Julio 2014

Transporte Cuántico en Grafeno: Interacción Dinámica de Intercambio y Estados Cuasi-unidimensionales Estacionarios

Simeón Moisés Yaro Medina

Sometido al
Departamento de Ingeniería Electrónica
Universidad Autònoma de Barcelona
para optar el grado de
Doctor en Ingeniería Electrónica

Dr. Xavier Oriols Pladevall
Director de Tesis

Dr. Xavier Cartoixà Soler
Director de Tesis

Simeón Moisés Yaro Medina
Doctorando

Barcelona, Julio 2014

Agradecimientos

Quiero expresar mí mas profundo agradecimiento al Prof. Xavier Oriols y Xavier Car-toixà, por la gran paciencia mostrada para concluir este trabajo. Su exigencia y ayuda constante me a permitido concretar las investigaciones desarrolladas.

Tambien quisiera agradecer a mis compañeros, con los cuales e compartido estos años por su amistad y ánimo permanente. Al igual que quisiera agradecer a Mn Gabriel Bayes, parroco de la Iglesia de Santa Creu de Bellaterra, por su ánimo constante para concluir la tesis.

Resumen

Esta tesis doctoral versa sobre el transporte electrónico en sistemas de baja dimensión. En particular, se utilizan diferentes formalismos para abordar fenómenos cuánticos en el transporte electrónico en grafeno.

Por una parte, se estudia la interacción de intercambio en los procesos de transporte electrónico dependientes del tiempo, mediante la teoría de trayectorias Bohmianas para paquetes de ondas. Se demuestra que la densidad de estados en el espacio de fases puede entenderse a través de la probabilidad de encontrar electrones con configuraciones similares. Debido a la repulsión de Pauli, cada electrón ocupa una región 2π en el espacio de fases. A través de la velocidad de los electrones, la densidad de estados electrónicos puede relacionarse con la densidad de flujo electrónico. La importancia de este nuevo concepto se hace evidente al tratar de modelizar la inyección de electrones en los nanodispositivos. En particular se muestra que la inyección balística en el grafeno es muy diferente de la inyección en nanodispositivos convencionales (con dispersiones parabólicas) debido a su particular relación de dispersión lineal y alta velocidad de Fermi. Este particular ritmo de entrada de electrones en el grafeno también produce un cambio importante en el ruido electrónico a alta frecuencia en el régimen balístico. Estos resultados abren nuevas perspectivas para el estudio del transporte cuántico dependiente del tiempo para muchos cuerpos.

Por otra parte, con el fin de explorar los efectos de producir nanoondulaciones en el grafeno, se realizó un estudio de las propiedades electrónicas de transporte utilizando la Teoría de la Densidad Funcional y la función de Green. Se predice la formación de transporte cuasi-unidimensional en nanoondulaciones de grafeno, marcado por la cuantización de la conductancia tanto para ondulaciones a lo largo de la orientación cristalográfica *armchair* como de la *zigzag*.

Abstract

This dissertation deals with electronic transport in low dimensional systems. In particular, quantum phenomena in electronic transport in graphene are addressed using different formalisms.

On one hand, the exchange interaction in time-dependent processes in electron transport is studied with Bohm trajectories for wavepackets. It is shown that the density of states in phase space can be understood through the probability of finding similar electron configurations. Due to the Pauli repulsion, each electron occupies a region 2π in phase space. Through the speed of electrons, the density of states (DOS) can be related to the density of flux (DOF). The relevance of this new concept is evident when modeling the injection of electrons into nanodevices. In particular, it is shown that ballistic injection in graphene is very different from injection into conventional nanodevices (with parabolic dispersions) due to its particular linear dispersion relation and high Fermi velocity. This particular rate of incoming electrons into graphene also produces a significant change in the high-frequency electronic noise in the ballistic regime. These results open new perspectives for the study of time-dependent many-body quantum transport.

On the other hand, in order to explore the effects of producing nanoripples in graphene, a study of electronic transport properties using the Density Functional Theory and the Green's function was performed. Quasi-one-dimensional transport in graphene nanocorrugations has been predicted, highlighted by the quantization of conductance for undulations along both its armchair and its zigzag crystallographic orientations.

Índice general

Agradecimientos	v
Resumen	vi
1. Introducción	1
1.1. Contexto	1
1.2. Transporte cuántico	2
1.3. ¿Qué es el transporte electrónico?	4
1.3.1. Transporte electrónico en sistemas de baja dimensión	8
1.4. Mecánica de Bohm	14
1.5. Propiedades electrónicas del grafeno	16
1.5.1. Estructura de capítulos:	20
2. Interacciones electron-electron descritas por trayectorias Bohmianas	23
2.1. Introducción	23
2.2. Trayectorias Bohmianas para funciones de onda de muchas-partículas . . .	25
2.2.1. Resumen de la función de onda de muchas partículas	25
2.2.2. Resumen de las trayectorias de muchas partículas	27
2.3. Trayectorias de muchas-partículas sin Funciones de onda de muchas-partículas	35
2.3.1. La función de onda condicional	35
2.3.2. Algoritmo para incluir interacción de intercambio en trayectorias Bohmianas de muchas partículas	36
2.3.3. Test para potenciales armónicos no separables	38
3. Densidad de flujo electrónico y modelo dinámico de inyección	43
3.1. Introducción	43
3.2. Densidad de estados electrónicos	43
3.2.1. Densidad de estados electrónicos en el espacio de fases	44
3.3. Densidad de flujo electrónico	51
3.4. Modelo de inyección de electrones	54
3.4.1. Distribución de corriente de electrones	55

4. Estados electrónicos cuasi-unidimensionales en ondulaciones de grafeno	59
4.1. Aproximación de la masa-efectiva: Fermiones de Dirac sin masa	59
4.1.1. Efecto del Campo Magnético Externo	61
4.1.2. Deformaciones locales en grafeno y pseudocampo magnético	62
4.2. Ondulaciones en grafeno	63
4.2.1. Programas y parámetros de cálculo	64
4.2.2. Plegando el grafeno	66
4.2.3. Pseudo-espín y Estados en el nivel $n = 0$	68
4.3. Transporte cuántico cuasi-unidimensional de electrones	72
5. Conclusiones	77
A. Apéndice I	79
B. Apéndice II	81
C. Lista de publicaciones y congresos	85

Índice de figuras

1.1.	<i>El punto P se transfiere entonces al punto P', y se puede decir que la energía a partir de P fue transportado al punto P'. Louis de Broglie [1]</i>	5
1.2.	(a) Gota de aceite rebotando en un baño de fluido vibrante. (b) A mayor amplitud de oscilación, la gota camina a través de la superficie, impulsada por su campo onda-piloto.[2]	6
1.3.	Heteroestructura semiconductor de GaAs/AlGaAs. El gas de electrones bidimensionales (2DEG), es formada en la región cercana a la interface, donde se forma un pozo de potencial triangular. Imagen de Wikipedia.	9
1.4.	Figura izquierda: Topografía por microscopía de fuerza atómica de un transistor de un electron, consistente de un punto cuántico (QD del ingles <i>Quantum Dot</i>) en contacto con los reservorios y un contacto de punto cuántico (QPC del ingles <i>Quantum Point Contact</i>) [3]. Figura derecha: Representación de un QPC de 50Å de ancho, acoplados a los reservorios semi-infinitos (imagen superior). Conductancia y DOS para un QPC se observa la formación de <i>steps</i> en la conductancia, aumentando para energías correspondientes a valores de DOS máxima.	12
1.5.	Figura izquierda: Representación de un OQD (punto cuántico acoplado a los reservorios). Los canales de entrada y salida tienen un largo de 40Å y la caja (Dot) interior presenta una dimensión de 120Å×120Å. La LDOS mostrada es obtenida mediante funciones de Green en la red. Figura derecha: OQD estudiado mediante trayectorias de Bohm [4]. Los resultados corresponden al primer pico de resonancia.	13
1.6.	Conductancia para un OQD. El OQD presenta picos de conductancia ($E \sim 0,1$ eV y $E \sim 0,15$ eV) que corresponden a resonancias de Fano. La DOS presenta un gran número de estados accesibles para estos últimos picos. . .	13
1.7.	Una débil interacción entre el sustrato (SiO ₂) y el grafeno, conserva la equivalencia de las subredes.	18
1.8.	El grafeno epitaxial interactúa fuertemente con el sustrato de SiC, afectando la equivalencia de las subredes del grafeno.	18
1.9.	En el grafito se observa que una subred de una capa se encuentra alineada con la subred de la capa inferior (sitios de color rojo). Ver texto.	18
1.10.	Celda unidad del grafeno, presentando las subredes A y B.	19

1.11. Estructura de bandas del grafeno (izquierda), presentando los denominados conos de Dirac alrededor de los puntos K y K' (derecha). Se observa la ausencia de un gap.	21
2.1. Evolución temporal de dos paquetes de onda.	31
2.2. (Color en línea) Modulos de la función de onda para dos no idénticas partículas en la 2D espacio de configuración en $t = 0$ fs.	32
2.3. (Color en línea) Dos partículas trayectorias Bohmianas con diferentes condiciones iniciales para las partículas que no son idénticos en el espacio libre.	32
2.4. (Color en línea) Evolución temporal de las energías totales e individuales del sistema de dos electrones no idéntico en el espacio libre. Total: sólido (verde) de la línea de energía total, el triángulo relleno (azul) de la energía cinética de Bohm total, ajusta discontinua (rojo) de la línea total de energía potencial cuántico. Partícula individual 1: círculo sólido (azul) de la línea de energía cinética de Bohm, círculo discontinuo (rojo) de la línea de energía potencial cuántico. Partícula individual 2: más sólido (azul) de la línea de energía cinética de Bohm, de trazos más (rojo) de la línea de energía potencial cuántico.	32
2.5. (Color en línea) Módulo de la función de onda para dos idénticos (a) fermión y (b) las partículas bosón en el espacio de configuración 2D en (a) $t = 267,8$ fs y (b) $t = 178,5$ fs.	34
2.6. (Color en línea) Dos partículas trayectorias Bohmianas con diferentes condiciones iniciales idénticas para (a) fermiones y (b) bosones las partículas en el espacio libre. La inserción es un zoom de las propiedades no cruce en diagonal.	34
2.7. (Color en línea) Evolución temporal de las energías totales e individuales de dos electrones idénticos (a) fermion y (b) boson en el espacio libre. Total: línea solida (verde) energía total, triangulo solido (azul) total energía cinetica de Bohm, línea entre cortada y cuadrado (rojo) energía potencial cuántica total. Partícula individual 1: círculo solido (azul) energía cinetica de Bohm, línea entre cortada y círculo (rojo) energía potencial cuántica. Partícula individual 2: lenea solida y (+) (azul) energía cinetica de Bohm, línea entrecortada y (+) (rojo) energía potencial cuántica.	34
2.8. (Color en línea) Evolución temporal de las energías totales e individuales (ensemble promedio) de sistema de dos electrones no idéntico bajo potencial no separable. Total: línea solida (verde) energía total, triangulo solido (azul) energía cinética total de Bohm, línea entre cortada y cuadrado (rojo) energía potencial cuántica total, línea entre cortada (negro) energía potencial. Partícula individual 1: círculo línea solida (azul) energía cinetica de Bohm, línea entre cortada y círculo (rojo) energía potencial cuántica. Partícula individual 2: línea sólida (+) (azul), línea entre cortada energía cinetica de Bohm, línea entre cortada y (+) (rojo) energía potencial cuántica.	40
2.9. (Color en línea) Evolución temporal de las energías totales e individuales (ensemble promedio) de sistema de dos electrones no idéntico bajo potencial no separable. Individual: línea solida (azul) energía cinética de Bohm de partícula 1 con la solución 2D exacta, línea solida y (+) (azul) energía cinetica de Bohm de la partícula 2 con la solución exacta 2D, línea punteada y cruces (x) (naranja) energía cinetica de Bohm de la partícula 1 con una aproximación 1D, líneas punteadas y cuadrados (naranja) energía cinetica de Bohm de la partícula 2 con la 1D aproximación.	40

<p>2.10. (Color en línea) Evolución temporal de las energías totales e individuales (ensemble promedio) de idéntico sistema de fermiones de dos electrones bajo potencial no separable. Total: línea sólida (verde) energía total, línea sólida y triángulo (azul) energía total cinética de Bohm, líneas entre cortadas y cuadrados (rojo) energía total potencial cuántica, línea entre cortada (negro) energía potencial. Partícula individual 1: línea sólida y círculo (azul) energía cinética de Bohm, línea entre cortada y círculo (rojo) energía potencial cuántica. Partícula individual 2: línea sólida y + (azul) energía cinética de Bohm, línea entre cortada y + (rojo) energía potencial cuántica.</p>	<p>42</p>
<p>2.11. (Color en línea) Evolución temporal del individuo (conjunto promedió) energías cinéticas de Bohm de idéntico sistema de fermiones de dos electrones bajo potencial no separable calculado a partir de 2D soluciones exactas y aproximadas 1D. Individual: línea sólida y círculo (azul) energía cinética de Bohm de la partícula 1 con la 2D soluciones exactas, línea sólida y + (azul) energía cinética de Bohm de la partícula 2 con la solución exacta de 2D, línea punteada y x (naranja) energía cinética de Bohm de partículas 1 con la aproximación 1D, línea punteada y cuadrado (naranja) energía cinética de Bohm de la partícula 2 con la aproximación 1D.</p>	<p>42</p>
<p>3.1. (Izquierda) Función de onda sometida a una condición de frontera de Dirichlet. (Derecha) Función de onda sometida a una condición de frontera de von Neumann.</p>	<p>47</p>
<p>3.2. Parte real (línea azul) e imaginaria (línea roja) de la función de onda de una partícula libre en 1D, para diferentes valores de momento. Presenta un momento cuantizado $p = 2\pi\hbar l/L$, $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ (izquierda) para una condición de borde tipo Born-von Karman (periodo L) y un momento continuo $p = \pm\sqrt{2m_e E}$ (derecha) para un onda extendida sobre todo el espacio.</p>	<p>48</p>
<p>3.3. (a) Probabilidad de no encontrar un segundo paquete con posiciones centrales $x_{o2} = x_2$ y vector de onda central $x_{o2} = x_2$ debido a la presencia de un electrón previo en $x_{o1} = 2 \mu m$ y $k_{o1} = 8 \mu m^{-1}$. (b) Contorno de la figura a. La línea de 0.31 corresponde a una elipse con un área de 2π.</p>	<p>51</p>
<p>3.4. (a) La presencia de $N=9$ electrones en una región del espacio de las fases implica que la probabilidad $P(\Phi)$ de encontrar $N=10$ electrones en esta región es prácticamente cero. (b) Dibujo del contorno de la figura (a) donde cada electrón esta separado una distancia normalizada d del resto. Cada electrón requiere un espacio de las fases de 2π para sí mismo.</p>	<p>52</p>
<p>3.5. Densidad de flujo (DOF) calculado a partir de la Eq. (3.17) para cada punto de un espacio de configuración $\{k_x, k_z\}$. Se presenta en número total de electrones inyectados durante 1 ps a 100 K, cuando la energía de Fermi era $E_f = 0,1 eV$. Para el silicio representado en esta figura, el valor máximo de la DOF aparece para las energías más altas que tienen mayor velocidad. En este caso v_x es separable y solo depende de $\{k_x\}$.</p>	<p>53</p>

3.6.	Densidad de flujo (DOF) calculada a partir de la Eq. (3.17) para cada punto de un espacio de configuración $\{k_x, k_z\}$. Se presenta en numero total de electrones inyectados durante 1 ps a 100 K, cuando la energía de Fermi era $E_f = 0,1 eV$. Para el grafeno el máximo de la DOF aparece en casi todos los puntos $\{k_x, k_z\}$, excepto en aquellos con k_z elevado [5]. La velocidad v_x depende explícitamente de $\{k_x, k_z\}$	54
3.7.	Presentación esquemática del modelo de inyección.	55
3.8.	Presentación esquemática del algoritmo de inyección.	56
3.9.	Número de electrones en función del valor de la corriente instantánea I durante la simulación de un 1 ps a 100 K, con una energía de Fermi de $E_f = 0,1 eV$ para Silicio. Hay una gran variedad de velocidades (corrientes).	57
3.10.	Número de electrones en función del valor de la corriente instantánea I durante la simulación de un 1 ps a 100 K, con una energía de Fermi de $E_f = 0,1 eV$ para Grafeno. Prácticamente todos los electrones se mueven con la misma velocidad (generan la misma corriente).	57
3.11.	Densidad espectral de potencia de las fluctuaciones de la corriente, $S(f)$, en función de la frecuencia f para el grafeno ideal balístico resistencias de dos terminales con $l_x=100nm$ y $L_z = 1\mu m$ con un nivel de Fermi $E_f = 0,05eV$. Los resultados muestran que el grafeno (rojo) tiene una mayor frecuencia de corte de $S(f)$ que el silicio (negro) a causa de que los pulsos de corriente generados por cada electrón son mas cortos. La presencia de una oscilación del grafeno (rojo) en $f_o \approx 1,5 THz$ está relacionada con el tiempo de $t_o = 1/f_o$ de la Ec. (3.16) que se ha utilizado.	58
4.1.	Espectroscopía en grafeno. a) Evolución de los niveles de Landau con el campo magnético para 4.4 K. b) Niveles de energías en función del parámetros reducido $(N B)^{1/2}$. [6].	62
4.2.	Figura izquierda: Simulación de nanoondulaciones en grafeno. Figura derecha: Medidas de LDOS y en la imagen interior se muestra la topografía por microscopía de efecto túnel. Cálculos y medición de [7].	64
4.3.	Imagen izquierda superior: Estructura de bandas del grafeno sin deformación, para una celda unitaria rectangular $L_x = 4a$ y $L_y = 5d/2$ donde $a=2.456 \text{ \AA}$ y $d=1.42 \text{ \AA}$. Tanto la estructura de bandas como la DOS (imagen inferior) muestran claramente la simetría entre la banda de conducción y valencia para energías entorno a la energía de Fermi (E_F)	65
4.4.	Imagen por microscopía de fuerza atómica de la morfología del grafeno sobre un substrato de Si/SiO ₂ , la escala corresponde a $0.4 \mu m$ [8].	66
4.5.	Estructura inicial de cálculo (previa a la relajación), El hecho mas llamativo es que la deformación no genera un gap en la estructura. Sin embargo la DOS muestra una asimetría entorno a la E_F . Esta geometría es similar a la morfología del substrato de la Fig. 4.4.	67

4.6. Evolución del proceso de relajación computacional. Si bien estas estructuras son artificiales, algunos experimentos muestran como al depositar el grafeno sobre substratos con geometrías definidas, generan estructuras similares a las mostradas en la Fig. 4.4.	68
4.7. Secuencia de ocho espectros de dI/dV (imagen A), correspondientes a distintas posiciones en la “burbuja” de grafeno (imagen B). Se puede observar la similitud de los gráficos A y C con los mostrados en la Fig. 4.13 (referencia [9])	69
4.8. Visualización de la LDOS para una orientación cristalográfica <i>armchair</i> (imagen superior) y <i>zigzag</i> (imagen inferior) correspondientes a energías muy cercanas al nivel de Fermi. Las ondulaciones corresponden a diferentes ángulos de inclinación: $\theta = 20^\circ$, 25° y 30° para el caso <i>armchair</i> , y $\theta = 45^\circ$, 60° y 65° para el caso <i>zigzag</i> . Las nanoondulaciones expuestas también han sido sugeridas en otros trabajos similares [10]	70
4.9. Cálculo de estructura de bandas para una ondulación de $\theta = 20^\circ$, $\mathbf{L} = 9,25 \text{ \AA}$ y $\mathbf{H} = 1,07 \text{ \AA}$	71
4.10. Cálculo de estructura de bandas para una ondulación de $\theta = 25^\circ$, $\mathbf{L} = 8,92 \text{ \AA}$ y $\mathbf{H} = 1,52 \text{ \AA}$	71
4.11. Cálculo de estructura de bandas para una ondulación de $\theta = 30^\circ$, $\mathbf{L} = 8,52 \text{ \AA}$ y $\mathbf{H} = 1,92 \text{ \AA}$	72
4.12. Disposición geométrica de los contactos. La dirección de transporte es paralela al eje \mathbf{X} , donde \mathbf{H} es la altura y \mathbf{L} la longitud de onda de la nanoondulación.	72
4.13. Dependencia de la estructura de banda con el <i>foldings</i> del grafeno.	73
4.14. Cálculos de la estructura de bandas, DOS y conductancia para una estructura ondulada con “borde” <i>armchair</i> con un ángulo inicial de $\theta = 75^\circ$. El cálculo de la conductancia muestra una cuantización bien definida para energías entorno a $\mathbf{E}-\mathbf{E}_F = -1,4\text{eV}$, $0,5\text{eV}$, $1,5\text{eV}$ y $1,75\text{eV}$	74
4.15. (Gráfico superior) Disposición geométrica de los contactos para una orientación con “borde” <i>zigzag</i> . Cálculo de la estructura de bandas, DOS y conductancia para una estructura ondulada con ángulo de $\theta = 70^\circ$. La conductancia muestra una cuantización bien definida para energías entorno a $\mathbf{E}-\mathbf{E}_F = -1,0\text{eV}$, $1,0\text{eV}$ y $1,5\text{eV}$	75

Capítulo 1

Introducción

1.1. Contexto

Los constantes avances en las tecnologías de fabricación micro y nanoelectrónicas han permitido validar la extrapolación que Moore realizó en 1965 sobre el número de transistores en los circuitos integrados (Ley de Moore [11]), llevándola hasta nuestros días y permitiendo incrementar exponencialmente las prestaciones de los dispositivos electrónicos. Sin embargo, y aunque el *Chief Technology Officer* de Intel afirmara en 2008 [12] que

I compare Moore's Law to driving down the road on a foggy night. How far can you see? ... We see no end in sight, and we've had 10 years visibility for the last 30 years.

tarde o temprano el escalado en dimensiones de las arquitecturas tradicionales (*More Moore*) se encontrará con límites fundamentales, relacionados con la fenomenología (típicamente cuántica) que aparece en la nanoescala, que afectarán al correcto funcionamiento de los dispositivos. De hecho, desde hace unos pocos años ya podemos observar un estancamiento en la frecuencia máxima de operación de los microprocesadores de los principales fabricantes, cambiándose el énfasis hacia la reducción del consumo de potencia o el aumento del número de *cores* físicos dentro de cada chip.

Una de las rutas para conseguir la mejora de las prestaciones de los dispositivos electrónicos pasa por diseñar nuevos dispositivos cuyo funcionamiento dependa precisamente de esos efectos que limitan las prestaciones en los diseños tradicionales. Aquí se enmarcan dispositivos como el diodo túnel resonante (RTD) [13] o el transistor de un solo electrón (SET) [14]. Otra de las rutas aprovecha los nuevos materiales y procesos que la explosión de las (nano)tecnologías en los últimos 25 años ha puesto a nuestro alcance. Por ejemplo, la inclusión del óxido de hafnio en las puertas de los MOSFETs ha permitido continuar con la reducción de la longitud del canal.

Dentro del conjunto de nuevos materiales, y aunando fenómenos cuánticos, destaca el grafeno (monocapa de grafito) por sus extraordinarias propiedades electrónicas y mecánicas, incluso a temperatura ambiente (ver la Sec. 1.5). Las expectativas de una nueva generación de productos basados en este extraordinario material ha llevado a la Comisión

Europea a financiar el Graphene Flagship [15], un proyecto con una duración de 10 años y una dotación total de 1000 millones de euros.

Así, en este contexto, y en particular en el del transporte electrónico basado en efectos cuánticos, se enmarca el trabajo de investigación presentado en esta tesis.

1.2. Transporte cuántico

El transporte cuántico es un ejemplo de la dinámica cuántica fuera del equilibrio [16, 17], donde existe una constante interacción e intercambio de partículas entre los reservorios y el sistema cuántico abierto. Esto se hace especialmente evidente cuando las dimensiones del dispositivo son pequeñas [18, 19]: el acoplamiento de sistemas de escala nanométrica (moléculas, puntos cuánticos, nanotubos, etc.) con ambientes macroscópicos (cuánticos o clásicos) genera fluctuaciones, por ejemplo en la corriente electrónica de nanoestructuras fuertemente influenciadas por la interacción de Coulomb [3]. Esta dependencia de los fenómenos cuánticos con el tiempo toma una gran importancia en los sistemas donde coexisten varios estados estacionarios [20, 21], o en la medida de procesos físicos de corta duración (corrientes AC a altas frecuencias, procesos de ruido), que típicamente son ocultados en la medida de corrientes promedio (dc) [22].

Cuando se estudia teóricamente el transporte de electrones, se suelen considerar muy bajas temperaturas y corrientes pequeñas, de tal forma que se puede considerar que los electrones no interactúan. La justificación para esta drástica simplificación se encuentra en la idea que sólo los electrones entorno a la energía de Fermi pueden participar en el transporte neto, y el bloqueo de Pauli suprime completamente eventos de dispersión entre electrones con menor y mayor energía al nivel de Fermi. Considerables esfuerzos se han realizado para determinar correctamente el potencial efectivo global para los electrones en la energía de Fermi, ya que las cargas positivas de fondo se apantallan en gran medida por los electrones del dispositivo [23]. Sin embargo al ir disminuyendo las dimensiones del dispositivo, esta aproximación ofrece resultados alejados a los experimentos [24].

Uno de los tramientos más comunes del transporte electrónico es la descripción *ab initio* limitada a un régimen de estados estacionarios de *scattering* y basada sobre el formalismo de Landauer combinada con la teoría de la densidad funcional (*Density Functional Theory* - DFT). Sin embargo esta aproximación es criticada sobre bases teóricas fundamentales, señalando principalmente defectos del funcional de correlación de intercambio de la DFT estática [25], tal como la discontinuidad de la derivada en la aproximación de la densidad local (*Local Density Approximation* - LDA) y la aproximación de los gradientes generalizados (*Generalized Gradient Approximation* - GGA). Otra limitación que se encuentra es la ausencia de correlación de intercambio en el formula de Landauer [26].

La necesidad de considerar la dependencia del tiempo y la interacción de muchas partículas (características de la cuántica fuera del equilibrio) en el transporte electrónico de los nuevos dispositivos nanométricos conduce a la comunidad científica a establecer una teoría más amplia que solucione las dificultades previas. Una de las posibles soluciones es la Teoría de la densidad funcional dependiente del tiempo (*Time-dependent Density Fun-*

ctional Theory - TDDFT) la cual aplica la misma filosofía de la DFT de Kohn-Sham. En esta teoría se reemplaza la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para muchos cuerpos, por un conjunto de ecuaciones dependientes del tiempo para una sola partícula, cuyos orbitales tienen la misma densidad $n(\mathbf{r}, t)$ [26, 27]. Otros métodos para abordar el problema del transporte cuántico fuera del equilibrio son: el funcional del grupo de renormalización [28], el grupo de renormalización de la matriz densidad dependiente del tiempo [29], la suma iterativa de integrales de trayectoria en tiempo real [30, 31], etc.

Si bien estos métodos y teorías logran solucionar muchas dificultades, no abordan la naturaleza de los sistemas cuánticos fuera de equilibrio y cómo a partir de ellos se puede llegar a los sistemas en equilibrio. Una de las teorías en abordar este tema es la desarrollada por Louis de Broglie (1892-1987) y David Bohm (1917-1992). En su interpretación de la mecánica cuántica un sistema cerrado es descrito por: i) su función de onda, la cual satisface la ecuación de Schrödinger; y ii) por la posición de unas partículas que se mueven determinísticamente a lo largo de trayectorias con velocidades que dependen de la función de onda. Esta teoría reproduce las predicciones de la mecánica cuántica estándar, obteniendo la distribución de las posiciones de las partículas sobre un ensemble de sistemas, todos descritos por la misma función de onda $\psi(x, t)$, la cual es dada por $|\psi(x, t)|^2$ [32]. Si bien su realidad subyacente ha sido objeto de larga discusión, las trayectorias de Bohm siempre pueden ser interpretadas como unas líneas de flujo asociadas a una visión hidrodinámica de la ecuación de Schrödinger [33].

Los sistemas en equilibrio cuántico obedecen la denominada regla de probabilidad de Born $\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$ que es la fundamental conexión entre el formalismo matemático de la teoría cuántica no relativista y los resultados experimentales. Un hecho remarcable es que esta regla emerge naturalmente de la dinámica de partículas de la teoría de onda-piloto de de Broglie-Bohm. Esta nos indica que la probabilidad cuántica surge de forma dinámica, y tiene un estatus similar a la probabilidad térmica de la mecánica estadística convencional. Valentini y Westman tienen ilustrado mediante simulaciones numéricas que una distribución de partículas fuera del equilibrio pueden relajarse a un equilibrio cuántico después de algún tiempo [34]. Este resultado fue también extendido por S. Colin para fermiones (partículas de Dirac) [35].

Estos resultados indican que la teoría de de Broglie-Bohm no requiere postular la “regla de Born”, sino que tiende a surgir dinámicamente al relajarse el sistema cuántico, haciendo que la formulación de la teoría cuántica de de Broglie-Bohm sea adecuada para estudiar el transporte electrónico fuera del equilibrio. Sin embargo, una dificultad presente en la teoría anterior surge del punto de vista computacional, al tener que solucionar directamente la ecuación de Schrödinger para muchos cuerpos interactuantes ¹. Éste es un importante problema a resolver y que dificulta el estudio de los fenómenos de transporte cuántico. Varias propuestas de solución recurren a la aproximación de la partícula independiente (no interactuante), conduciendo a limitaciones al estudiar el comportamiento colectivo de los portadores de carga y los efectos de interacción e intercambio característicos de los electrones.

¹Debemos indicar que esta dificultad también está presente en la mecánica cuántica convencional

Para entender la dificultad computacional podemos recordar que, en mecánica clásica, el número de variables que describen el estado de un *ensemble* de partículas crece con el número de partículas, de tal forma que el tiempo de cálculo y la memoria requerida para realizar la simulación son en general funciones polinómicas del tamaño físico del sistema. Esta propiedad de los sistemas clásicos se pierde a nivel nanoscópico, ya que los estados cuánticos requieren un número de recursos que crece en forma exponencial con el número de partículas [36]. Esta característica está en la base de la complejidad exponencial de la mecánica cuántica, e impide una eficiente simulación de la dinámica de un sistema de muchos cuerpos [37]. Una propuesta muy interesante que está dando buenos resultados para solucionar este problema es la desarrollada por X. Oriols, donde las trayectorias de Bohm de muchas partículas, asociadas a la función de onda condicional, permiten realizar una aproximación que hace accesible el cálculo para un sistema de muchas partículas sin abandonar las propiedades de interacción de intercambio [38].

Debido a estas favorables características, utilizaremos la descripción en términos de trayectorias de de Broglie-Bohm para abordar el transporte cuántico dependiente del tiempo en nanoestructuras de grafeno considerando la interacción de intercambio para muchas partículas. Para la parte de la tesis que estudia transporte DC en grafeno, utilizaremos el formalismo de Landauer combinado con la DFT mediante los programas SIESTA y TRAN-SIESTA.

A continuación profundizaremos sobre las características del transporte electrónico cuántico, en la mecánica de de Broglie-Bohm y las propiedades electrónicas del grafeno.

1.3. ¿Qué es el transporte electrónico?

¿Qué entendemos como transporte de electrones? Una respuesta válida puede (por lo menos en primera aproximación) sustentarse en nuestra experiencia diaria, donde observamos objetos que parten de un punto y después de un tiempo determinado aparecen en otra posición ². Si bien el electrón es un objeto cuyo comportamiento es regido por la mecánica cuántica (donde no puede ser medida con gran precisión su posición y momento), esto no imposibilita seguir manteniendo nuestra concepción de transporte. Una de las primeras personas que defendió este planteamiento fue Louis de Broglie en 1927 (ver Fig. 1.1). Algunos ejemplos muy descriptivos son la propagación de un solitón (una onda solitaria que se propaga sin deformarse en un medio no lineal) y la propagación de una *bouncing drop* (gota milimétrica inducida a rebotar sobre un baño de fluido, por la vibración de una bañera con oscilación cercana a la frecuencia de resonancia de la gotita, Fig. 1.2). En la mecánica clásica gobernada por las leyes de Newton, el transporte de partículas es comprendida como el movimiento de la materia, donde los conceptos de trayectoria y desplazamiento son claramente definidas: la trayectoria es determinada por la posición inicial (x_o), la velocidad inicial (v_o) y una ley de movimiento $f(x, v, t)$, mientras que el desplazamiento es

²Diremos que un punto material P (ver 1.1) se mueve, cuando existe una correspondencia **unívoca** entre el conjunto de instantes [T] correspondientes a una duración definida por el reloj [R] y el *continuo* de tres dimensiones cartesianas y afín asociado a los ejes (Ox,Oy,Oz). [39]

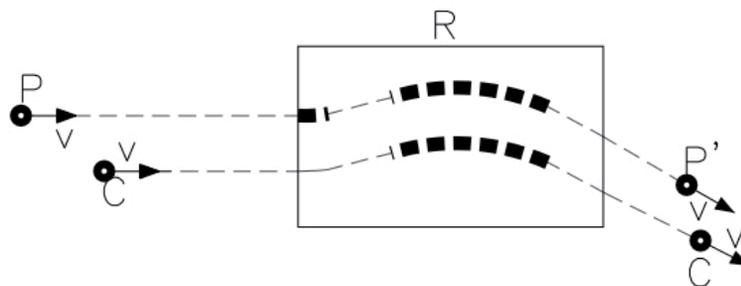


Figura 1.1: El punto P se transfiere entonces al punto P' , y se puede decir que la energía a partir de P fue transportado al punto P' . Louis de Broglie [1]

la distancia entre la posición inicial y final ($d = |f(x_F, v_F, t = t_F) - f(x_o, v_o, t = 0)|$). Estos conceptos son de gran utilidad al investigar el comportamiento de gases (mecánica estadística), los fenómenos termodinámicos (equilibrio térmico, transferencia de calor, entropía, etc.), movimiento de ondas mecánicas y electromagnéticas.

En 1900, después de muchos años de éxitos de la mecánica clásica surgieron nuevos fenómenos que no podían ser explicados con las teorías desarrolladas hasta entonces. En los siguientes años brillantes científicos desarrollaron la mecánica cuántica, que tiene entre una de sus particularidades el describir el comportamiento ondulatorio de la materia. De esta forma al conocer una nueva característica de la materia (carácter ondulatorio), se logró en las siguientes décadas desarrollar nuevas teorías y métodos que permitieron comprender y predecir nuevas propiedades.

Una de las dificultades que la mecánica cuántica tiene que enfrentar es el problema de la interacción de muchos cuerpos. En la física de la materia en estado sólido, la “teoría del funcional de la densidad” tiene un éxito importante y muestra gran utilidad al investigar las propiedades electrónicas. También sirve como base para muchas investigaciones de transporte electrónico, que combinan esta teoría con otros métodos como “la función de Green de la red”, que explicamos más adelante.

Teoría del Funcional de la Densidad Un sólido puede entenderse como un gas de electrones sometido a una red periódica de iones, donde se consideran las interacciones: electrón-electrón, electrón-ion e ion-ion, donde tanto los electrones como iones tienen energía térmica.

Nosotros consideramos nuestros estudios en el estado fundamental ($T = 0K$, donde no hay movimiento térmico) porque las posiciones de los niveles energéticos no varían significativamente para un sistema con $T \neq 0K$. Asimismo, la función de Fermi-Dirac muestra una variación pequeña a 300K respecto a $T = 0K$.

El estado del sistema que conforma el sólido puede escribirse como:

$$\Psi(x_1, \dots, x_N, X_1, \dots, X_M) \quad , \quad x_i = (\mathbf{r}_i, s_i) \quad \text{y} \quad X_i = (\mathbf{R}_i, S_i) \quad (1.1)$$

donde \mathbf{r}_i y s_i son respectivamente los vectores posición y el spin de los electrones, de forma

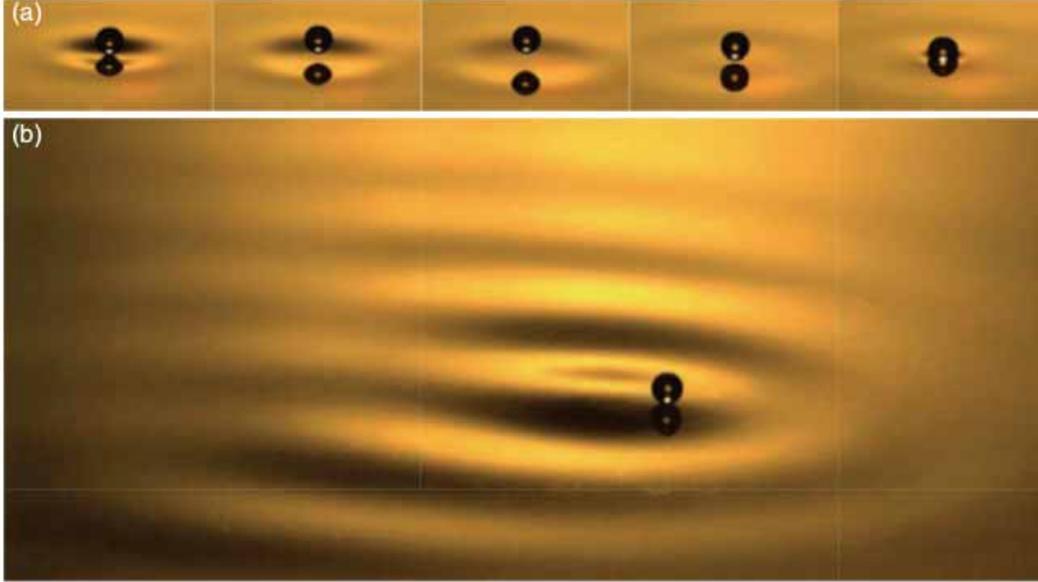


Figura 1.2: (a) Gota de aceite rebotando en un baño de fluido vibrante. (b) A mayor amplitud de oscilación, la gota camina a través de la superficie, impulsada por su campo onda-piloto.[2]

análoga \mathbf{R}_i y S_i son los vectores posición y spin de los iones de la red. Los electrones que están localizados alrededor de los iones establecen fuertes enlaces formando una coraza de electrones. En cambio los electrones más alejados son débilmente ligados al ion y tienden a deslocalizarse en el sólido.

Considerando todas las interacciones del sistema, podemos escribir el Hamiltoniano del sólido (en unidades atómicas) de la siguiente manera:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_i^N \nabla_i^2 - \frac{1}{2} \sum_i^M \nabla_{R_i}^2 + \sum_{i<j}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_l^M \sum_i^N \frac{Z_l}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_l|} + \sum_{l<k}^M \frac{Z_l Z_k}{|\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_k|} \quad (1.2)$$

donde los dos primeros términos de la derecha contienen toda la energía cinética de los electrones e iones.

La aproximación de "Born-Oppenheimer-Näherung" nos permite tratar separadamente a los electrones e iones, esto debido a que los electrones son partículas livianas que siguen el inmediato movimiento de los iones (mucho más pesados). Así, primero se resuelve la estructura electrónica (aproximadamente estacionaria), y luego se utiliza la energía hallada del estado electrónico base (fundamental) como función de la configuración iónica, que sirve como una energía potencial para el movimiento de los iones [40].

De este modo, la ecuación de Schröindger (obtenida a partir de las ecuaciones (1.1) y (1.2)) para los electrones en una configuración iónica dada se puede escribir de la forma:

$$\left[-\frac{1}{2} \sum_i^N \nabla_i^2 + \sum_{i < j}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_l^M \sum_i^N \frac{Z_l}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_l|} \right] \Psi(x_1, \dots, x_N, \{X_i\}) = \varepsilon \Psi(x_1, \dots, x_N, \{X_i\}) \quad (1.3)$$

quedando la solución desacoplada del movimiento de los iones.

Si bien la aproximación de "Born-Oppenheimer-Näherung" nos permite enfocar nuestro estudio a los electrones, su gran número en el sólido (del orden de 10^{23}) y su dependencia de las coordenadas tanto del resto de electrones como de las posiciones de los iones, impiden abordar el problema en forma directa. Además, debemos recordar que el electrón posee spin ($s = \frac{1}{2}$), por lo que su función de onda total deber ser antisimétrica, i.e.: $\Psi(x_1, \dots, \mathbf{x}_m, \dots, \mathbf{x}_n, \dots, x_N, \{X_i\}) = -\Psi(x_1, \dots, \mathbf{x}_n, \dots, \mathbf{x}_m, \dots, x_N, \{X_i\})$ de lo que se desprende el principio de exclusión de Pauli. El cumplimiento de este principio por parte de la función de onda del sistema de electrones lleva a la formulación del determinante de Slater, que expresa la función de onda como una determinante de funciones de onda de un electrón [41].

El problema entonces fue replanteado y, gracias al trabajo de Hohenberg y Kohn, en 1965 se halló una solución aceptable que derivó en la **Teoría del Funcional de la Densidad** (DFT) que repasaremos rápidamente a continuación.

La DFT ³ tiene como antecedente los trabajos de Thomas (1927) y Fermi (1928), cuya idea básica es usar la densidad electrónica $n(r)$ como la cantidad fundamental en lugar de la función de onda de los N-electrones [41].

$$n(\mathbf{r}_1) = N \int \dots \int \Psi(x_1, \dots, x_N, \{X_i\}) \Psi^*(x_1, \dots, x_N, \{X_i\}) ds_1 dx_2 \dots dx_N \quad (1.4)$$

La densidad electrónica es la probabilidad de encontrar uno de los N electrones en un volumen elemental dr_1 , para una configuración arbitraria de los $N - 1$ electrones restantes (ver ecuación 1.4). De esta manera se reduce el número de coordenadas espaciales de $3N$ a sólo 3 ($r = (x, y, z)$), manteniendo toda la información necesaria para determinar el Hamiltoniano del Sistema [43].

Aun que sus resultados no llegaron a buen término, en 1964 Hohenberg y Kohn mostraron que para el estado fundamental el método de Thomas-Fermi puede ser considerado como una aproximación a una teoría exacta, la Teoría del Funcional de la Densidad (ver [41]). Esta teoría se basa en dos teoremas enunciados a continuación (ver [44]):

- Dado un sistema mecánico cuántico estacionario, cualquier observable (incluída la energía) puede ser calculada, en principio exáctamente, conociendo solamente la densidad del estado fundamental $n(r)$.
- La densidad del estado fundamental puede ser calculada, en principio exactamente, usando un método variacional que involucra solamente el potencial externo aplicado.

³Un funcional $F[h(r)]$ es un objeto F que asigna un escalar a cada función $h(r)$ definida sobre un dominio Ω , $r \in \Omega$ [42].

El primer postulado es la responsable de la reducción del número de coordenadas espaciales mencionada anteriormente, mientras que el segundo establece una forma de obtener la densidad en el estado fundamental.

La aplicación de estos teoremas a la determinación de la energía total del sistema, bajo la sujeción que el número de partículas se mantenga, fue realizada en 1965 por Kohn y Sham [45], quienes después de una adecuada redistribución de la energía del sistema, obtuvieron las ecuaciones que llevan su nombre:

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{\text{eff}}\right] \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi_i(\mathbf{r}). \quad (1.5)$$

Aquí $\psi_i(\mathbf{r})$ son los orbitales de Kohn-Sham, de los que la densidad electrónica es $n(\mathbf{r}) = e \sum_{i=1}^N |\psi_i(\mathbf{r})|^2$. El potencial efectivo V_{eff} considera la interacción electrón-electrón en forma promediada bajo la aproximación del electrón independiente (ver [44]).

La expresión (1.5) es muy semejante a la ecuación de Schrödinger, sin embargo ésta es obtenida bajo otro punto de vista. La solución es alcanzada por un método autoconsistente debido a que V_{eff} depende de $n(\mathbf{r})$, que a la vez es función de las $\psi_i(\mathbf{r})$.

Aun así, y aunque la autoconsistencia en la solución de la ecuación de Kohn-Sham puede ser enfrentada computacionalmente, los cálculos que conlleva se hacen muy costosos y su aplicación directa impracticable para sistemas con un número de electrones elevado (del orden de 5000 átomos o superior). Afortunadamente, el teorema de Bloch [46] permite reducir enormemente el número de electrones que deben ser tratados explícitamente en sistemas periódicos.

A continuación estudiamos el efecto de la dimensión en las propiedades electrónicas.

1.3.1. Transporte electrónico en sistemas de baja dimensión

El efecto de la dimensión en el transporte electrónico es un tema intensamente estudiado por la física mesoscópica. En los sistemas de baja dimensión los efectos de interferencia cuántica, los fenómenos de interacción coulombiana y las fluctuaciones tiene un papel predominante en sus propiedades.

Un efecto interesante de la dimensionalidad de las propiedades electrónicas se muestra en la densidad de estados (DOS, density of states) para un gas de electrones libres:

$$\rho(E) \propto E^{d/2-1} \quad (1.6)$$

donde d es la dimensión del sistema. Así, para un gas en tres dimensiones (3D), tenemos que la DOS es proporcional a la raíz cuadrada de la energía, mientras que para un sistema 2D la densidad es constante y en los sistemas 1D disminuye con la energía.

Un gas de electrones bidimensional se puede conseguir experimentalmente en una unión GaAs-AlGaAs con modulación de dopaje [47], donde se forma un pozo triangular (Fig. 1.3) en la región cercana a la interficie. Esto permite confinar los electrones en una dirección, mientras que quedan libres en las otras dimensiones.

Este pozo triangular permite la formación del gas de electrones bidimensional (2DEG). El gas de electrones puede ser manipulado a través de puertas (gates) que, por medio de

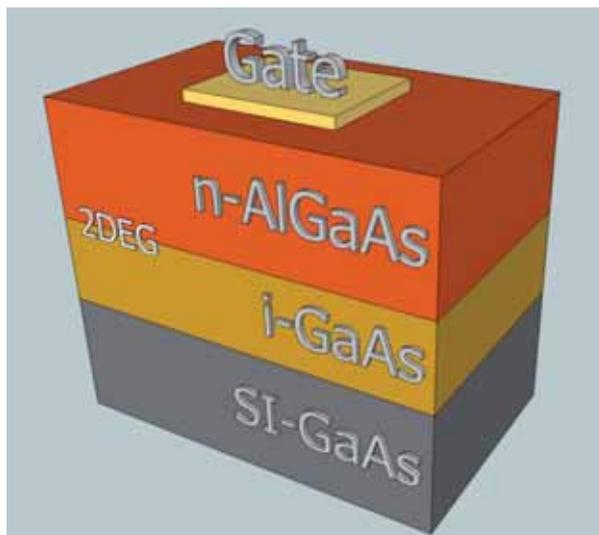


Figura 1.3: Heteroestructura semiconductor de GaAs/AlGaAs. El gas de electrones bidimensionales (2DEG), es formada en la región cercana a la interface, donde se forma un pozo de potencial triangular. Imagen de Wikipedia.

la repulsión eléctrica, permiten el confinamiento de electrones, formando puntos cuánticos, nanohilos y estructuras similares.

Con la obtención experimental de una monocapa de grafito, llamado grafeno [48], se cuenta con un material adecuado para estudiar fenómenos mesoscópicos en dos dimensiones (2D) gracias a su alta movilidad de portadores ($10000 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ a temperatura ambiente [49]). Asimismo, su estructura de bandas no presenta *gap*, debido a lo cual tiene propiedades interesantes como el tunelamiento cuántico de Klein [50], lo que por otro lado conduce a dificultades en el confinamiento de portadores de carga por medio de técnicas convencionales [49].

En los últimos años se están llevando a cabo estudios teóricos de la conductividad en nanoestructuras de grafeno utilizando métodos tales como la función de Green, simulaciones Monte Carlo, etc.

Método de la función de Green en la red

En la mecánica cuántica el Hamiltoniano del sistema total contiene toda la información del sistema de forma tal que resolviendo la ecuación de autovalores ($\mathbf{H}|\Psi\rangle = \varepsilon|\Psi\rangle$) obtenemos la energía y la función de onda del sistema. Sin embargo cuando estudiamos el transporte cuántico, se distingue tres regiones bien diferenciadas: dos reservorios (electrodo izquierdo y derecho) y la región de dispersión (por ejemplo una nano-estructura). Generalmente se considera que la única región afectada por campos magnéticos o eléctricos es la región de dispersión, donde los electrodos se consideran ideales (los electrones no sufren dispersión) y semi-infinitos. Esta última característica de los contactos es lo que dificulta el cálculo computacional, especialmente al resolver la ecuación secular. Otra consideración

muy importante es el acoplamiento de los electrodos con la región de dispersión.

El hamiltoniano total del sistema se puede escribir como:

$$\mathbf{H} = \left(\begin{array}{c|c|c} \mathbf{H}_L + \boldsymbol{\Sigma}_L & \mathbf{V}_L & 0 \\ \hline \mathbf{V}_L^\dagger & \mathbf{H}_C & \mathbf{V}_R \\ \hline 0 & \mathbf{V}_R^\dagger & \mathbf{H}_R + \boldsymbol{\Sigma}_R \end{array} \right), \quad (1.7)$$

donde \mathbf{H}_L , \mathbf{H}_R y \mathbf{H}_C son las matrices del hamiltoniano de los electrodos izquierdo (L del ingles *left*), derecho (R del ingles *right*) y la región de dispersión (C), y \mathbf{V}_L (\mathbf{V}_R) son las matrices de interacción de los electrodos con la nanoestructura. El acoplamiento de L y R a la parte semiinfinita de los electrodos es colocada en forma de autoenergías $\boldsymbol{\Sigma}_L$ y $\boldsymbol{\Sigma}_R$.

Un método de gran utilidad en el estudio de las propiedades de transporte electrónico es la función de Green de la red [51]. Podemos obtener la función de Green para una partícula, a partir de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\mathbf{G}^\pm(E) \equiv \frac{1}{(E \pm i\delta)\mathbf{I} - \mathbf{H}}, \quad (1.8)$$

considerando que $\delta \rightarrow 0^+$. Expresando la función de Green en terminos de los eigenvalores y eigenvectores de \mathbf{H} obtenemos:

$$\mathbf{G}^\pm(E) = \sum_l \frac{|\phi_l\rangle\langle\phi_l|}{E \pm i\delta - \varepsilon_l}. \quad (1.9)$$

En lo que sigue solo utilizaremos el operador de Green G^+ , asociado a la propagación de la función de onda adelante en el tiempo. En la representación de sitios, los elementos de la matriz de Green son obtenidos a partir de los estados $|\mathbf{r}\rangle$ y $|\mathbf{r}'\rangle$, que son completamente determinados por los indices de sitios $\mathbf{r} \equiv (m, n)$, $\mathbf{r}' \equiv (m', n')$ en dos dimensiones, y de esta forma podemos escribir la función:

$$\mathbf{G}^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \mathbf{G}^+(mn, m'n'; E) \equiv \langle \mathbf{r} | \mathbf{G}^+(E) | \mathbf{r}' \rangle. \quad (1.10)$$

Si escribimos el Hamiltoniano de la ecuación 1.7 en la representación de sitios podemos, utilizando la ecuación 1.8, obtener la matriz de la función de Green del sistema para una energía E .

El cálculo de las autoenergías para los electrodos semiinfinitos L o R se pueden obtener en forma independiente, realizando el cálculo analítico de la función de Green o recursivamente mediante la ecuación de Dyson $\mathbf{G}^{+L(R)}(E) = \mathbf{G}^{+0}(E) + \mathbf{G}^{+L(R)}(E)\mathbf{V}_{L(R)}\mathbf{G}^{+0}(E)$, donde $\mathbf{G}^{+0}(E) = [(E + i\delta)I - \mathbf{H}_{L(R)}^0]^{-1}$ es la energía del electrodo infinito. Así tenemos que la expresión para el cálculo de las autoenergías es:

$$\boldsymbol{\Sigma}_{L(R)}(E) \equiv [\mathbf{V}_{L(R)}\mathbf{G}^{+L(R)}(E)\mathbf{V}_{L(R)}^\dagger].$$

Calculada la matriz de la función de Green (1.8) de la heteroestructura en la representación de sitios, $\mathbf{G}(m', n'; E)$, podemos estudiar las propiedades del transporte electrónico,

como la conductancia, la densidad de estados y la densidad local de estados (LDOS del inglés *local DOS*). Mediante el formalismo de Landauer-Büttiker tenemos las siguientes expresiones:

$$\mathcal{G}(E) = \frac{2e^2}{h} T(E), \quad (1.11)$$

donde la probabilidad de transmisión es dada por:

$$T(E) = \text{Tr} \left(\Gamma_L \mathbf{G}_{1M} \Gamma_R \mathbf{G}_{1M}^\dagger \right); \quad \Gamma_{L(R)} \equiv i \left[\Sigma_{L(R)}(E) - \Sigma_{L(R)}^\dagger(E) \right].$$

La densidad de estados es dada por:

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \Im (\text{Tr}[\mathbf{G}(E)]) , \quad (1.12)$$

y la densidad local de estados:

$$\rho_E(m', n') = -\frac{1}{\pi} \Im (\mathbf{G}(m', n'; E)) . \quad (1.13)$$

A continuación hacemos una rápida revisión del transporte electrónico balístico de sistemas mesoscópicos de baja dimensión.

Confinamiento en un gas de electrones bidimensional (2DEG)

En sistemas mesoscópicos pueden distinguirse dos regímenes principales de transporte: balístico y difusivo, existiendo también casos intermedios entre ellos. Estos se pueden definir siguiendo la relación entre dos longitudes características: camino libre medio (l) y la longitud de relajación de fase (L_ϕ)⁴. Cuando el camino libre medio es más grande que las dimensiones del dispositivo, se da el transporte balístico. Por otro lado, si el tamaño del dispositivo es mucho mayor que el camino libre medio el transporte es difusivo [51]. En todos los cálculos presentados en este capítulo se considera un régimen de transporte balístico.

Aquí estudiamos el transporte paralelo a la interface de la heteroestructura, que forma un sistema bidimensional similar al grafeno. Estos sistemas bidimensionales permiten diseñar diferentes configuraciones de gates (puertas) posibilitando la manipulación del gas de electrones y permitiendo estudiar propiedades interesantes como la conductancia.

La figura 1.4 muestra arriba un hilo cuántico, donde la región oscura corresponde a la posición de las puertas. Se obtienen valores de transmisión constante en intervalos de energía, similares a los observados en el caso de transporte unidimensional. La DOS muestra, en las mismas regiones de energía, un comportamiento asintótico. Estos resultados están de acuerdo con la existencia de canales de transmisión en nanohilos cuánticos [52] (cuantización de la conductancia). Cada salto en la transmisión corresponde a la entrada de un nuevo canal de transporte.

⁴**Camino libre medio:** Longitud entre dos colisiones (con impurezas, fonones, otros electrones...) sucesivas. **Longitud de relajación de fase:** La función de onda en mecánica cuántica tiene una *fase*. Ésta es importante en los procesos de interferencia, donde la función de onda del electrón tiene diferentes pre-historias (información de los sucesos previos) que son reunidas en un mismo punto. Así la L_ϕ es la distancia que viaja un electrón antes que su fase cuántica inicial sea destruida [52].

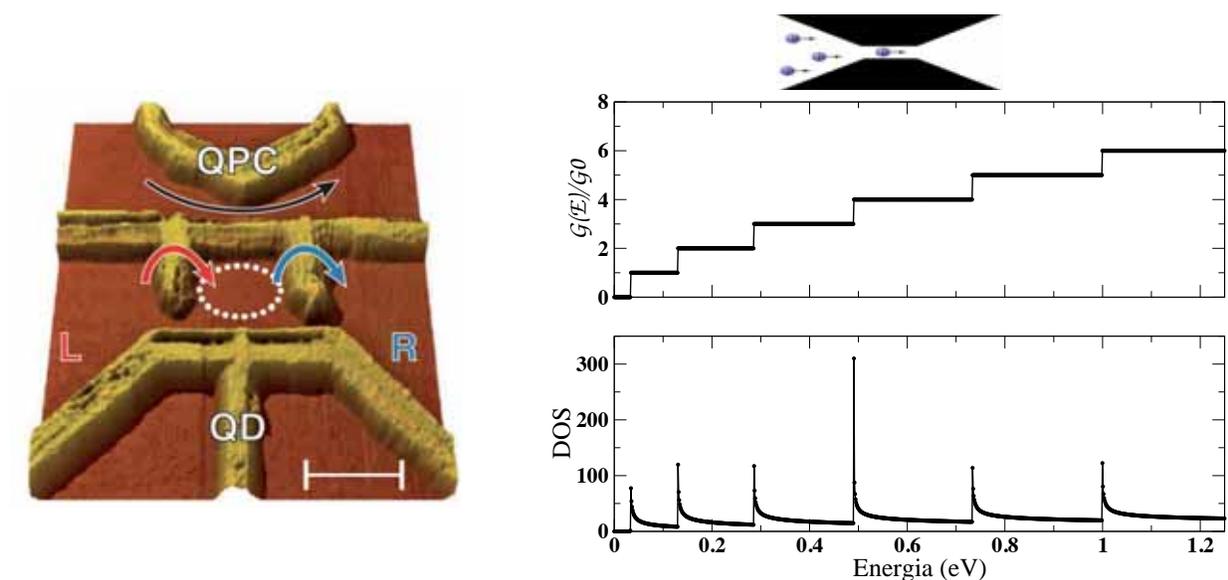


Figura 1.4: Figura izquierda: Topografía por microscopía de fuerza atómica de un transistor de un electron, consistente de un punto cuántico (QD del ingles *Quantum Dot*) en contacto con los reservorios y un contacto de punto cuántico (QPC del ingles *Quantum Point Contact*) [3]. Figura derecha: Representación de un QPC de 50Å de ancho, acoplados a los reservorios semi-infinitos (imagen superior). Conductancia y DOS para un QPC se observa la formación de *steps* en la conductancia, aumentando para energías correspondientes a valores de DOS máxima.

Puntos Cuánticos Abiertos

Una pequeña modificación en los hilos cuánticos producen una importante modificación en los estados electrónicos del dispositivo. Un sistema de gran interés son los denominados puntos cuánticos abiertos (OQD de inglés *Open Quantum Dot*). En la figura 1.5 izquierda, se muestra un OQD, donde la región blanca limitada por la línea negra corresponde a los *gates*. Este tipo de sistemas se caracteriza por presentar estados confinados dentro de la caja cuántica.

El cálculo de la conductancia y la DOS se muestra en la figura 1.6. Los estados discretos (picos entorno a $E \sim 0,035$ eV y $E \sim 0,075$ eV) están asociados con la caja cuántica, y los estados continuos están asociados con los canales de entrada y salida dados por los *quantum point contacts*, ver Fig.1.5. Las dos últimas resonancias (picos finos entorno a $E \sim 0,1$ eV y $E \sim 0,15$ eV) corresponden al acoplamiento efectivo entre los estados discretos y continuos (resonancias de Fano).

La LDOS para el estado fundamental (primer pico de resonancia Fig. 1.6) de un OQD se muestra en la Fig. 1.5-izquierda (el máximo se observa en el centro de la caja). Los gates del dispositivo están limitados por la línea continua negra.

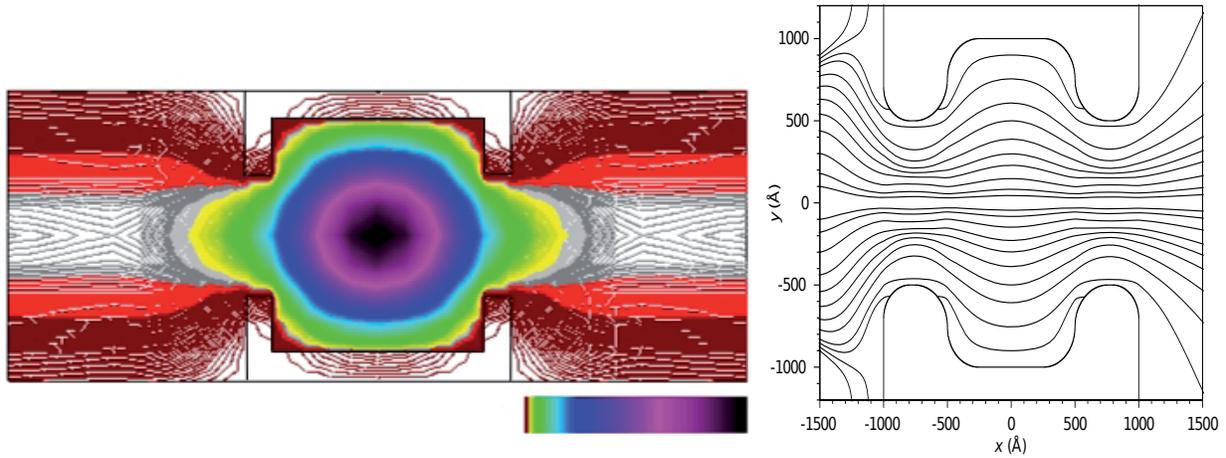


Figura 1.5: Figura izquierda: Representación de un OQD (punto cuántico acoplado a los reservorios). Los canales de entrada y salida tienen un largo de 40\AA y la caja (Dot) interior presenta una dimensión de $120\text{\AA} \times 120\text{\AA}$. La LDOS mostrada es obtenida mediante funciones de Green en la red. Figura derecha: OQD estudiado mediante trayectorias de Bohm [4]. Los resultados corresponden al primer pico de resonancia.

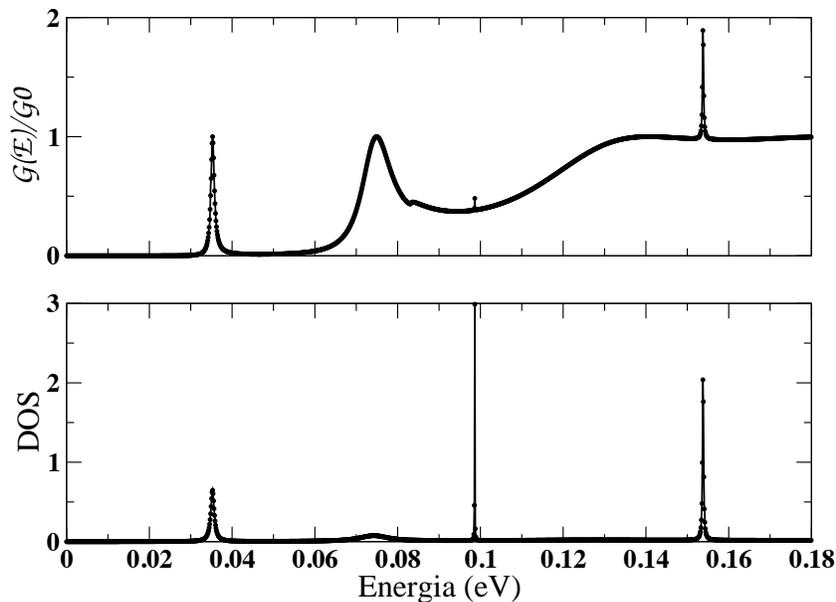


Figura 1.6: Conductancia para un OQD. El OQD presenta picos de conductancia ($E \sim 0,1\text{ eV}$ y $E \sim 0,15\text{ eV}$) que corresponden a resonancias de Fano. La DOS presenta un gran número de estados accesibles para estos últimos picos.

1.4. Mecánica de Bohm

En 1952, David Bohm crea una nueva interpretación de la mecánica cuántica que reproduce todas las predicciones de la mecánica cuántica estándar, pero manteniendo la descripción mediante trayectorias de las partículas [53]. La mecánica cuántica significó un cambio abrupto respecto a la teoría desarrollada por Newton, el lenguaje utilizado por ambas teorías es diferente. La teoría clásica provee una explicación de un experimento físico en términos de una trayectoria bien definida; la teoría cuántica “ortodoxa” utiliza en cambio una función de onda. La teoría cuántica de Bohm permite ver que ambas: descripción ondulatoria de un ensemble de partículas clásicas y la descripción de un sistema cuántico con trayectorias son posibles [54].

Trayectorias en mecánica cuántica La mecánica de Bohm es una teoría sobre partículas con una localización definida. La teoría indica la trayectoria en el espacio físico de estas partículas y el objeto que determina la trayectoria es la función de onda. De esta forma, para una sola partícula podemos escribir la función de onda $\psi(x, t) = \psi_r(x, t) + i\psi_i(x, t)$, en coordenadas polares como:

$$R^2(x, t) = \psi_r^2(x, t) + \psi_i^2(x, t)$$

$$S(x, t) = \hbar \arctan \left(\frac{\psi_i(x, t)}{\psi_r(x, t)} \right)$$

donde $S(x, t)$ es la llamada acción cuántica. Esta función no está bien definida cuando $\psi_r(x, t) = \psi_i(x, t) = 0$, que corresponde al punto donde $R(x, t) = 0$. Por lo que nosotros asumimos que la función de onda es univaluada así $R(x, t)$ es también univaluada.

Si introducimos $\psi(x, t) = R(x, t) \exp(iS(x, t)/\hbar)$ en:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t)\psi(x, t) \quad (1.14)$$

podemos encontrar para la parte imaginaria **la ecuación de la continuidad local**:

$$\frac{\partial R^2(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m} \frac{\partial S(x, t)}{\partial x} R^2(x, t) \right) = 0, \quad (1.15)$$

y para la parte real obtenemos **la ecuación cuántica de Hamilton–Jacobi**:

$$\frac{\partial S(x, t)}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S(x, t)}{\partial x} \right)^2 + V(x, t) + Q(x, t) = 0. \quad (1.16)$$

El termino adicional corresponde al denominado “potencial cuántico”:

$$Q(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 R(x, t)/\partial x^2}{R(x, t)} \quad (1.17)$$

justamente este potencial es quien diferencia la ecuación cuántica de Hamilton–Jacobi (1.16) de su expresión clásica. El *momentum* de una partícula en mecánica clásica es dada por $p = \partial S(x, t)/\partial x$ de lo que podemos deducir que la velocidad de cada trayectoria $x(t)$ es dada por:

$$v(t) = \left[\frac{1}{m} \frac{\partial S(x, t)}{\partial x} \right]_{x=x[t]}. \quad (1.18)$$

Es interesante indicar que la velocidad de Bohm también puede ser obtenida a partir de:

$$v(x, t) = \frac{J(x, t)}{|\psi(x, t)|^2} \quad (1.19)$$

donde $J(x, t)$ es la densidad de corriente definida por:

$$J(x, t) = i \frac{\hbar}{2m} \left(\psi(x, t) \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial x} - \psi^*(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right); \quad (1.20)$$

y $|\psi(x, t)|^2$ es la distribución del *ensemble* de partículas. Es fácil mostrar que la definición de velocidad es compatible con la ecuación de la continuidad (1.15).

Definiendo la derivada total respecto al tiempo $d/dt = \partial/\partial t + v \cdot \partial/\partial x$ y aplicándola a la velocidad de Bohm, tenemos la versión cuántica de la segunda ley de Newton:

$$m \frac{d}{dt} v(x(t), t) = - \frac{\partial}{\partial x} (V(x, t) + Q(x, t)) \quad (1.21)$$

Teoría de la Onda-piloto de de Broglie En 1927 de Broglie propuso una nueva forma de dinámica para un sistema de muchos cuerpos (de Broglie 1928). Para N partículas no relativistas sin espín, con una configuración $q(t) = (\mathbf{x}_1(t), \mathbf{x}_2(t), \dots, \mathbf{x}_N(t))$ y masas m_i , las velocidades en el tiempo t vienen dadas por la ecuación guía de de Broglie

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \frac{\nabla_i S}{m_i}, \quad (1.22)$$

donde $i = 1, 2, \dots, N$. S es la fase de la onda compleja $\Psi(q, t)$ en el espacio de configuraciones, y satisface la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \sum_{i=1}^N - \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \Psi + V \Psi \quad (1.23)$$

donde V es un potencial externo clásico y $\Psi = |\Psi| e^{iS}$ es la función de onda en su forma polar.

Las predicciones de la mecánica cuántica estándar pueden ser obtenidas de la dinámica de de Broglie definida por (1.22), (1.23) y asumiendo que un *ensemble* de partículas con una función de onda inicial $\Psi(q, 0)$ tiene una configuración $q(0)$ distribuida por la regla de Born con una densidad de probabilidad

$$P(q, 0) = |\Psi(q, 0)|^2 \quad (1.24)$$

en el espacio de configuración para $t = 0$. Sin embargo esta última suposición puede ser deducida por la dinámica de de Broglie, que puede describir la evolución de un sistema fuera del equilibrio, algo que la mecánica cuántica estándar no realiza [55].

En la siguiente sección estudiamos las propiedades de un nuevo material llamado grafeno, que en los últimos años tiene gran interés por presentar nuevos fenómenos en el transporte cuántico (anomalías del efecto Hall, tunelamiento de Klein, alta movilidad a temperatura ambiente, etc.)

1.5. Propiedades electrónicas del grafeno

El grafeno es un material bidimensional cuyo grosor es de un átomo. Su estructura laminar está compuesta de átomos de carbono que forman una red hexagonal tipo panal de abejas. A partir de la popularización de su síntesis el año 2004 por el grupo liderado por André Geim de la Universidad de Manchester, ha tenido un gran interés por sus propiedades electrónicas, mecánicas y químicas. A continuación mostraremos las principales propiedades que le otorgan muchas de sus interesantes cualidades.

Características como su composición química, estructura cristalina y su interacción con agentes externos como el substrato, son algunos factores importantes que determinan sus propiedades electrónicas. A continuación detallamos estos puntos:

Composición química Los átomos de carbono en el grafeno presentan enlaces covalentes. El carbono tiene cuatro electrones de valencia ocupando los orbitales $2s$, $2p_x$, $2p_y$ y $2p_z$. Estos estados se mezclan fácilmente generando hibridaciones (combinación de orbitales $2s$ con $2p$). En el caso del grafeno se tiene tres electrones con hibridación sp^2 , conocida como enlaces tipo σ . Estos unen el carbono con sus tres átomos vecinos manteniendo así la estabilidad estructural del material. El electrón restante tiene un estado p_z (enlace tipo π) y es responsable del transporte electrónico.

Estructura cristalina El grafeno presenta una estructura cristalina bidimensional, similar al panal de abejas. Sus propiedades electrónicas están fuertemente vinculadas a su perfección estructural. Así, tenemos que la movilidad eléctrica del grafeno es alta, del orden de $10,000 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ a $T=300\text{K}$ [48]. La movilidad eléctrica sin embargo se ve fuertemente reducida por la presencia de defectos o vacancias en la red [56].

Métodos de preparación como la exfoliación mecánica ofrecen **estructuras cristalinas de alta calidad**, con dimensiones del orden de las $100\mu\text{m}$ [57]. Este método tiene la dificultad de presentar un bajo rendimiento de síntesis (pequeña porción de grafeno por mm^2 de área del substrato). Otras técnicas, como la reducción química de óxido de grafito, solucionan el problema bajo el costo de tener una menor movilidad eléctrica. Esto es debido a la formación de vacancias en la red que no pueden ser reparadas durante las síntesis [58]. Existen adicionalmente otras técnicas de preparación de grafeno como son la CVD (chemical vapor deposition), el crecimiento epitaxial (que recientemente ha obtenido capas de grafeno con excelentes propiedades eléctricas) y otras técnicas que a partir del grafito

pirolítico altamente ordenado, logran desacoplar las primeras capas teniendo estructuras de grafeno muy ordenadas.

La importancia de la perfección estructural del grafeno se refleja también en el carácter balístico del transporte del electrón en distancias submicrométricas [48].

Efectos del sustrato A partir de la preparación del grafeno el sustrato constituye un agente perturbador. Por ejemplo, en la exfoliación mecánica el sustrato sirve como soporte mecánico [48] (ver Fig. 1.7), sin embargo para el grafeno epitaxial el sustrato adicionalmente es una matriz de crecimiento (SiC) [59](ver Fig. 1.8).

En la interacción del sustrato con el grafeno se puede identificar dos efectos: el primero está relacionado con una alteración de la homogeneidad de los portadores de carga, reduciendo la calidad de las propiedades electrónicas [60]. Esto se hace evidente cuando comparamos las medidas de transporte en grafeno sobre sustrato de SiO_2 con muestras suspendidas en el aire. La movilidad electrónica para este último caso es 10 veces mayor que cuando utilizamos un sustrato [61]. Estos resultados están en acuerdo con las predicciones teóricas que consideran que las propiedades de transporte electrónico pueden ser explicados mediante la dispersión por impurezas cargadas en el sustrato [62].

La segunda forma como el sustrato afecta las propiedades del grafeno está vinculada a su estructura cristalina. Se puede identificar en el grafeno dos subredes equivalentes (ver Fig. 1.10), que definen una polarización de subred para el estado electrónico. La presencia de impurezas [63] o la interacción del grafeno con la estructura del sustrato [64],[60] producen inequivalencias en las subredes que afectan su estructura electrónica de bandas al formar un gap en torno a la energía de Fermi. Algunos ejemplos son el sustrato de nitrato de boro que presenta una estructura hexagonal [65] y el carburo de Silicio (SiC) que sirve para el crecimiento epitaxial de grafeno (ver Fig. 1.11), [66].

Es interesante examinar la interacción entre capas del grafito pirolítico altamente orientado (HOPG). En especial en aquellos donde se tiene un apilamiento tipo \mathcal{AB} (ver Fig. 1.9) donde la subred de una monocapa se encuentra directamente debajo de otra subred. Esto es también observado en las bicapas de grafeno, donde al aplicar un campo eléctrico perpendicular modulamos el acoplamiento entre capas, generando una inequivalencia y abriendo un gap en la estructura de bandas [49].

Relación de dispersión lineal y pseudospin Muchas de las propiedades electrónicas del grafeno son consecuencia de la estructura hexagonal de átomos de carbono. Especial atención tiene el **pseudospin**, que esta asociado a los estados *bonding* y *antibonding* del grafeno. El cual tienen su origen en la red hexagonal (estructura cristalina) y su composición química (hibridización sp^2), que permite definir dos subredes equivalentes (ver Fig. 1.10). El sustrato más una perturbación (por ejemplo un campo eléctrico) permiten modular una polarización en las subredes, es decir generar estados bien definido del electrón en una subred A o B [67].

El acoplo de los electrones de los orbitales p_z es el principal responsable de las propiedades del transporte electrónico. Esto es de gran utilidad si se hace uso del método *tight*

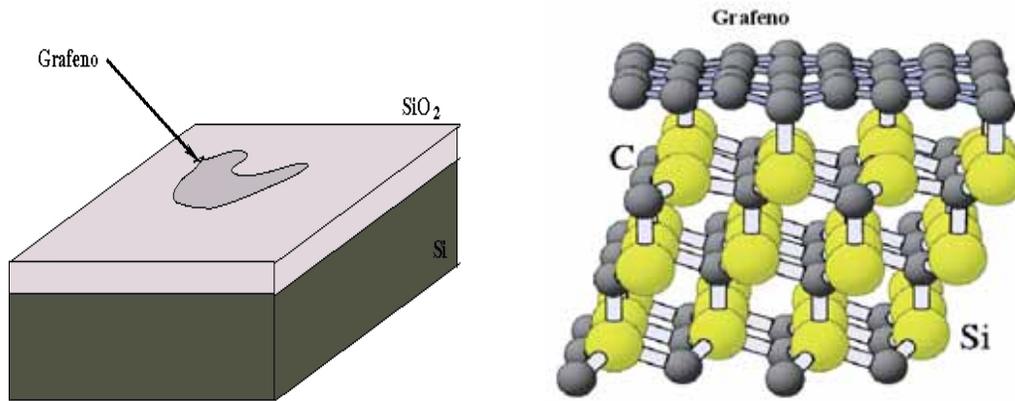


Figura 1.7: Una débil interacción entre el sustrato (SiO₂) y el grafeno, conserva la equivalencia de las subredes.

Figura 1.8: El grafeno epitaxial interacciona fuertemente con el sustrato de SiC, afectando la equivalencia de las subredes del grafeno.

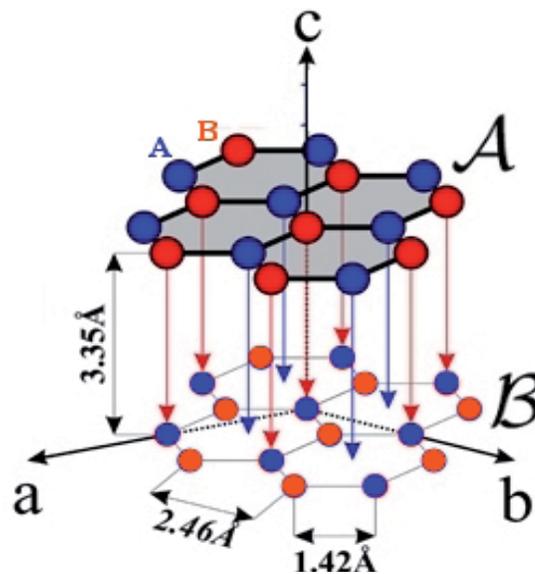


Figura 1.9: En el grafito se observa que una subred de una capa se encuentra alineada con la subred de la capa inferior (sitios de color rojo). Ver texto.

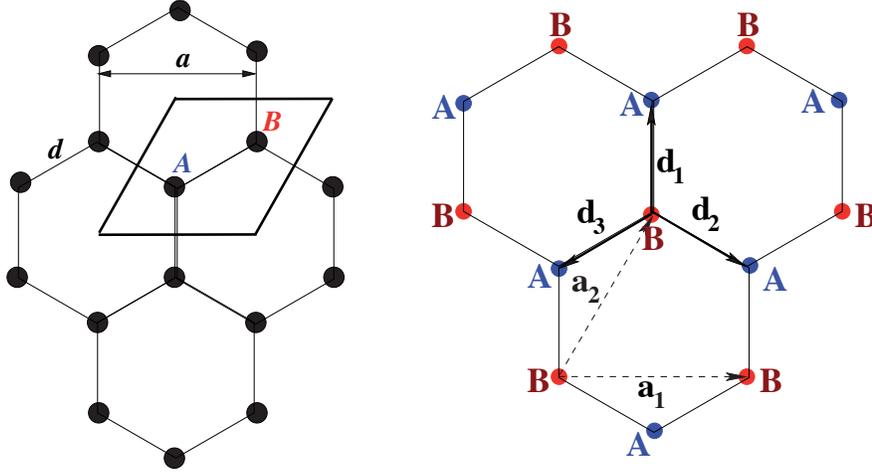


Figura 1.10: Celda unidad del grafeno, presentando las subredes A y B.

binding para estudiar la estructura electrónica del grafeno. En ese contexto definimos como vectores base:

$$\mathbf{a}_1 = a(1, 0) \quad , \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3})$$

donde $a = \sqrt{3}d = 2,46\text{\AA}$. Se puede identificar que estos vectores definen dos subredes (ver Fig. 1.10), que son conectadas por:

$$\mathbf{d}_1 = \left(0, \frac{a}{\sqrt{3}}\right) \quad , \quad \mathbf{d}_2 = \left(\frac{a}{2}, \frac{-a}{2\sqrt{3}}\right)$$

$$\mathbf{d}_3 = \left(\frac{-a}{2}, \frac{-a}{2\sqrt{3}}\right)$$

donde $d = |\mathbf{d}| = 1,42\text{\AA}$. Los correspondientes vectores de la red recíproca pueden ser encontrados mediante la relación:

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad ; \quad i, j = 1, 2$$

$$b_1 \cdot a_1 = \frac{2\pi}{a} \left(1, \frac{-1}{\sqrt{3}}\right) \cdot (a, 0) = 2\pi$$

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \left(1, \frac{-1}{\sqrt{3}}\right)$$

$$b_1 \cdot a_2 = \frac{2\pi}{a} \left(1, \frac{-1}{\sqrt{3}}\right) \cdot \left(\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}a\right) = 0$$

$$b_2 \cdot a_1 = \frac{2\pi}{a} \left(0, \frac{2}{\sqrt{3}}\right) \cdot (a, 0) = 0$$

$$b_2 \cdot a_2 = \frac{2\pi}{a} \left(0, \frac{2}{\sqrt{3}}\right) \cdot \left(\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}a\right) = 2\pi$$

La función de onda del electrón se escribe como:

$$|\Psi\rangle = C_A|\psi_A\rangle + C_B|\psi_B\rangle \quad (1.25)$$

donde han definido las sumas de Bloch

$$|\psi_\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}_\alpha} e^{ik \cdot \mathbf{r}_\alpha} |\phi_\alpha\rangle \quad , \quad \alpha = A, B \quad (1.26)$$

aquí $|\phi_\alpha\rangle$ es una base ortogonal del orbital p_z de un átomo de carbono en el sitio A o B, y el vector \mathbf{r}_α se extiende sobre todos los sitios de la red del grafeno.

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_A & -\mu \\ -\mu^* & \varepsilon_B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_A \\ C_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} C_A \\ C_B \end{pmatrix} \quad (1.27)$$

Aquí la energía del sitio es

$$\varepsilon_A = \varepsilon_B = \varepsilon$$

y la interacción entre átomos en diferentes sitios viene dada por

$$\mu = \sum_{\mathbf{r}_A} \sum_{\mathbf{r}_B} e^{ik \cdot (\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A)} \langle \phi_A | H | \phi_B \rangle \quad , \quad t = \langle \phi_A | H | \phi_B \rangle \quad (1.28)$$

donde el parámetro t (*hopping*) es el acoplamiento de los orbitales p_z . En caso de considerar la interacción entre primeros vecinos, se obtiene:

$$\mu = t \left(e^{ik \cdot \mathbf{d}_1} + e^{ik \cdot \mathbf{d}_2} + e^{ik \cdot \mathbf{d}_3} \right) = t \left[e^{\frac{ik_y a}{\sqrt{3}}} + 2e^{\frac{-ik_y a}{2\sqrt{3}}} \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \right]$$

Finalmente, la relación de dispersión del grafeno se puede obtener a partir de la solución de la ecuación secular (1.27):

$$E(k_x, k_y) = \varepsilon \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_y a\right) \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_x a}{2}\right)} \quad (1.29)$$

Se puede elegir el origen de energías de manera que $\varepsilon = 0$ y $t \approx 3,0\text{eV}$ según resultados experimentales [68].

En la zona de *Brillouin* se puede identificar puntos de alta simetría (ver Fig. 1.11). Particular importancia tienen los puntos no-equivalentes K y K' , donde la relación de dispersión alrededor de la energía cero (nivel de Fermi en el grafeno) representa los denominados conos de Dirac.

1.5.1. Estructura de capítulos:

El plan de trabajo a seguir en los siguientes capítulos es:

El segundo capítulo aborda el estudio de la interacción de intercambio para muchas partículas desde la teoría de de Broglie-Bohm dependiente del tiempo. El tercer capítulo estudia el efecto de introducir la estadística de inyección de electrones en el grafeno. Finalmente en el cuarto capítulo realizamos un estudio de las propiedades electrónicas de los sistemas cuasi-unidimensionales en una monocapa ondulada de grafeno.

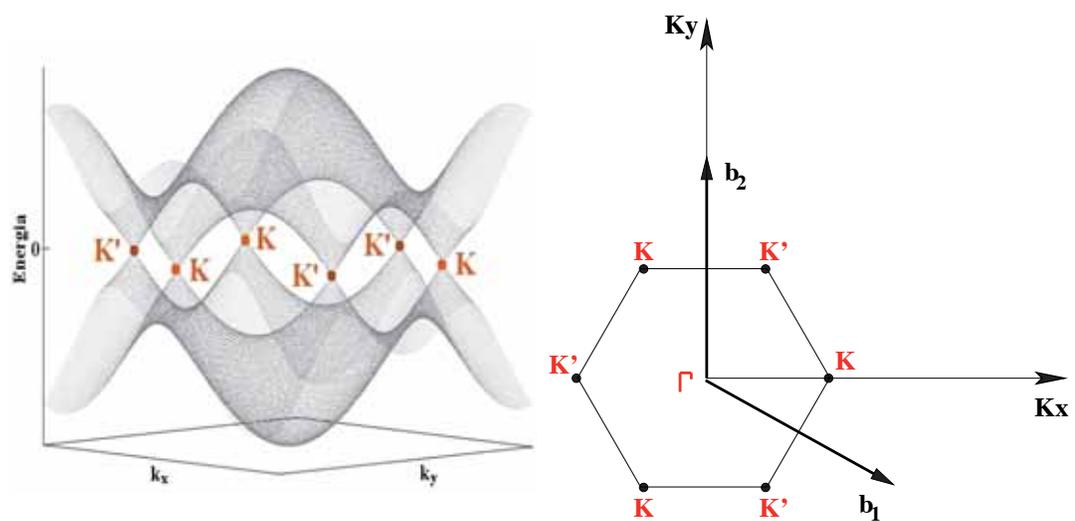


Figura 1.11: Estructura de bandas del grafeno (izquierda), presentando los denominados conos de Dirac alrededor de los puntos K y K' (derecha). Se observa la ausencia de un gap.

Capítulo 2

Interacciones electron-electron descritas por trayectorias Bohmianas

2.1. Introducción

Un sistema con N -partículas idénticas da lugar a una serie de fenómenos fascinantes. Sólo las funciones de onda cuya densidad de probabilidad se mantiene sin cambios bajo permutaciones de partículas son una buena descripción de dicho sistema. Para hamiltonianos separables, dichas funciones de onda pueden ser construidos a partir de las funciones de onda de una sola partícula. Sin embargo, para hamiltonianos no separables, el esfuerzo computacional asociada a la obtención de la función de onda de N -partículas hace que la solución exacta sea inaccesibles en las situaciones más prácticas. **Esto se conoce como el problema de muchos cuerpos** [69]. Ha habido un esfuerzo constante entre la comunidad científica para dar soluciones a problemas de muchos cuerpos. Las soluciones del método Monte Carlo Cuántico de la ecuación de Schrödinger proporcionan soluciones aproximadas para hamiltonianos exactos de muchas partículas [70, 71]. El Hartree-Fock (HF) algoritmo [72, 73] se aproxima a la función de onda de muchas partículas por un determinante de Slater de funciones de onda de una partícula que no interactúan. Aunque se sabe que la función de onda de Hartree-Fock no puede acercarse a la función original de la onda de muchas partículas, puede proporcionar información útil sobre el original estado fundamental. Alternativamente, la teoría del funcional densidad (density functional theory DFT) muestra que la densidad de carga se puede utilizar para calcular cualquier observable sin el conocimiento explícito de la función de onda de muchas partículas [74, 75]. Cálculos prácticos de la DFT hace uso del teorema Kohn-Sham [76] que proporciona un sistema de N funciones de onda de una sola partícula (no interactuantes) que son capaces de proveer un sistema de ecuaciones para encontrar la densidad de carga exacta del sistema interactuante $n(\vec{r})$. Sin embargo, la complejidad del sistema de muchos cuerpos todavía está presente en el llamado funcional de intercambio-correlación (*exchange-correlation* functional) que es desconocido y necesita ser aproximado. La DFT ha tenido un gran éxito, sobre todo, en la química [77] y ciencia de materiales [78]. Ambos, tratan sistemas en equilibrio. La técnica

más exitosa para los sistemas fuera del equilibrio es la extensión de la técnica DFT de escenarios que dependen del tiempo desarrolladas a través del teorema de Runge-Gross [79], que se conoce como la teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo (TDDFT). En contraste con el estado estacionario DFT, donde existe un funcional de intercambio exacto, aproximaciones a los funcionales de intercambio-correlación en función del tiempo se encuentran todavía en su infancia. El TDDFT ha sido reformulado en términos de la densidad de corriente [80, 81] y extendido a una densidad de corriente estocástica dependiente del tiempo cuando el sistema está interactuando con un baño térmico [82].

La estrategia común en todas las aproximaciones de muchas partículas es obtener el resultado observable de las entidades matemáticas que "viven" en un espacio real, \mathbf{R}^3 , en lugar de utilizar directamente la función de onda de muchas partículas cuyo apoyo se define en el espacio de configuración, \mathbf{R}^{3N} . Por ejemplo, el DFT utiliza la más simple (escalar) densidad de carga, $n(\vec{r})$ se define en el espacio real \mathbf{R}^3 . De forma idéntica, el HF utiliza funciones de onda de una partícula en \mathbf{R}^3 .

La mecánica de Bohm [83, 54, 84, 85], brevemente explicada en la introducción, es una explicación consistente de los fenómenos cuánticos basados en el uso de funciones de onda y trayectorias. En este formalismo se puede encontrar de forma natural una función de onda de una sola partícula que "vive" en el espacio real, \mathbf{R}^3 , sin dejar de reflejar las características de muchas partículas del sistema. Dicha función de onda se llama función de onda condicional [54] y está construida mediante la sustitución de todos los grados de libertad presentes en la función de onda de muchas partículas, excepto uno, por sus correspondientes trayectorias Bohmianas. Esta sustitución produce una función de onda de una sola partícula con una complicada dependencia temporal [86]. Recientemente, las trayectorias Bohmianas de muchas-partículas asociadas a la función de onda condicional han sido investigadas por el grupo de Oriols et al. [86, 87]. En el presente capítulo se discute cómo la interacción de intercambio puede ser tomado en cuenta con el uso de (aproximadas) funciones de onda de Bohm condicionales. La idea se indicó brevemente por uno de los autores en la original Ref. [86]. En este caso, se explica en detalle las propiedades de las trayectorias Bohmianas para partículas idénticas y demostrar su viabilidad computacional para estudiar el transporte cuántico en la (no- equilibrio) dispositivos nanoelectrónicos.

El trabajo se organiza de la siguiente manera. En Sec. 2.2 proporcionamos una introducción a las funciones de onda de muchas partículas y la mecánica de Bohm. Para dicha introducción, vamos a utilizar las funciones de onda de muchas partículas para hamiltonianos separables. Desde un punto de vista didáctico, estas trayectorias Bohmianas serán útiles para discutir cómo la interacción de intercambio determina su comportamiento. En Sec. 2.3, vamos a explicar cómo calcular las trayectorias Bohmianas de muchas partículas para partículas idénticas de hamiltoniano no separable. En particular, vamos a calcular las trayectorias sin calcular la función de onda de muchos-cuerpos.

2.2. Trayectorias Bohmianas para funciones de onda de muchas-partículas

En esta sección, presentamos las funciones de onda de muchas-partículas y la mecánica de Bohm para explicar las propiedades generales de las trayectorias Bohmianas asociados a partículas idénticas.

2.2.1. Resumen de la función de onda de muchas partículas

Para un no-relativistas sistemas abiertos de N -partículas, una expresión general para una función de onda de muchas partículas, $\Phi \equiv \Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$, con o sin interacción de intercambio, es:

$$\Phi = C \sum_{s_{z1}, \dots, s_{zN}} \Psi_{s_{z1}, \dots, s_{zN}}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) \gamma(s_{z1}, \dots, s_{zN}), \quad (2.1)$$

donde \vec{r}_i representa las posiciones de los i -partículas y s_{zi} es el z -componente de el espín que puede tomar el valor $s_{zi} = \hbar/2$ (o \uparrow_i) para espín *up* y $s_{zi} = -\hbar/2$ (o \downarrow_i) para espín *down*. El C es una constante de normalización. La suma en Eq. (2.1) es sobre toda posible combinación de espín.

Utilizamos la base de los espín individuales en lugar de la base del espín total, porque **estamos interesados en sistemas abiertos, donde las partículas (espines) se intercambia con el exterior**. Entonces, el requisito de espín total constante (implícito en la base del espín total) no es en absoluto evidente.

En la mayoría de las discusiones de este documento vamos a suponer que el sistema cuántico se describe justamente por uno de los terminos de la Eq. (2.1). En particular, vamos a considerar el término en que todos los espines son paralelos, es decir, $s_{zi} = \uparrow_i$. Con el fin de simplificar la notación, la parte orbital de este término se escribirá como $\Psi \equiv \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$, sin ninguna referencia a los espines porque su intercambio se vuelve irrelevante. Por lo tanto, la función de onda (orbital) es solución de la siguiente ecuación de Schrödinger de muchas-partículas:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\sum_{k=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_k^2 + U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) \right) \Psi, \quad (2.2)$$

donde m es la masa de electrón libre y $U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$ es un potencial no separable. Por construcción, sabemos que la solución de la Eq. (2.2) satisface la siguiente ecuación de continuidad:

$$\frac{d|\Psi|^2}{dt} + \sum_{k=1}^N \vec{\nabla}_{\vec{r}_k} \cdot \vec{J}_{\vec{r}_k} = 0, \quad (2.3)$$

donde $\vec{J}_{\vec{r}_k} \equiv \vec{J}_{\vec{r}_k}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$ son los valores esperados de la densidad de corriente de probabilidad[88] y $|\Psi|^2$ la densidad de probabilidad presente. Este último resultado será relevante en Sec. 2.2.2 cuando presentamos trayectorias Bohmianas.

Función de onda de muchas partículas con interacción de intercambio

Dos partículas cuánticas se dice que son iguales si no hay ningún experimento que pueden detectar las diferencias entre ellos. Se entiende que nos referimos a experimentos cuánticos donde el *output* es un valor ensemble obtenido después de repetir muchas veces el mismo experimento. Por ejemplo, la medida ensemble de la partícula 1 es idéntica a la medida ensemble de la partícula 1. Esta restricción en los resultados observables de un experimento cuántico puede ser satisfecha mediante la imposición de la siguiente propiedad en la función de onda Ψ de partículas idénticas:

$$\Psi(\cdot, \vec{r}_i, \cdot, \vec{r}_h, \cdot, t) = e^{i\gamma} \Psi(\cdot, \vec{r}_h, \cdot, \vec{r}_i, \cdot, t), \quad (2.4)$$

para algún índice i y h . Nosotros consideramos $\gamma = 0 \pmod{2\pi}$ para bosones (simétrico) y $\gamma = \pi \pmod{2\pi}$ para fermiones (antisimétrico).

En general, este comportamiento simétrico o antisimétrico de la función de onda no cambia con el tiempo. Para que se cumpla la invarianza con el tiempo se requiere que el potencial de muchas partículas en la Eq. (2.2) permanece invariante bajo la permutación de dos posiciones, es decir, $U(\cdot, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_h, \cdot, t) = U(\cdot, \vec{r}_h, \dots, \vec{r}_i, \cdot, t)$, que es el caso general para partículas idénticas. Entonces, si la Eq. (2.4) es satisfecha en un instante de tiempo, esta relación se cumple para todos los instantes.

Nosotros decimos que el sistema tiene interacción de intercambio cuando la función de onda satisface la Eq. (2.4). Excepto en la última parte de este capítulo, consideramos un sistema de N partículas en un espacio libre, así que la función de onda de muchas partículas puede ser calculada a partir de un determinante de Slater. Por simplicidad, cada partícula la definiremos en un espacio 1D real \mathbf{R} . La función de onda de muchas partículas $\Psi(x_1, \dots, x_N, 0)$ en $t = 0$ puede ser construida a partir de los siguientes paquetes de onda gaussianos de una partícula:

$$\psi_i(x_i, 0) = \frac{\exp(i k_{oi} x_i)}{(\pi \sigma_{x_i}^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{(x_i - x_{oi})^2}{2\sigma_{x_i}^2}\right), \quad (2.5)$$

donde σ_{x_i} es la dispersión espacial, x_{oi} la posición central, $E_{oi} = (\hbar k_{oi})^2 / (2m)$ la energía central de cada paquete de onda y k_{oi} el vector de onda central. Entonces, la función de onda de N partículas $\Psi(x_1, \dots, x_N, 0)$ para partículas idénticas se puede definir desde el determinante de Slater como:

$$\Psi(x_1, \dots, x_N, 0) = C \sum_{l=1}^{N!} \prod_{i=1}^N \psi_i(x_{p(l)_i}, 0) \text{sign}(\vec{p}_l), \quad (2.6)$$

donde la suma es sobre todas $N!$ permutaciones $\vec{p}_l = \{p(l)_1, \dots, p(l)_N\}$ con $\text{sign}(\vec{p}_l) = \pm 1$ el signo de las permutaciones. La variable C es una constante de normalización. Sobre la otra mano, la función de onda para las partículas no idénticas se puede escribir como:

$$\Psi(x_1, \dots, x_N, 0) = \prod_{i=1}^N \psi_i(x_{p(l)_i}, 0), \quad (2.7)$$

que, por construcción, ya está bien normalizada a la unidad.

El valor colectivo de la energía cinética de la i -partícula que pertenece a un sistema de partículas idénticas o no idénticas se calcula como:

$$\langle T_i \rangle = \int \dots \int \Psi^* \hat{T}_i \Psi dx_1 \dots dx_N, \quad (2.8)$$

De aquí en adelante, a menos que se especifique, las integrales espaciales se supone que se extienden sobre todo el espacio de configuración. El operador de energía cinética es $\hat{T}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$. Cuando se utiliza la función de onda en Eq. (2.6), uno puede darse cuenta fácilmente de que $\langle T_i \rangle = \langle T_h \rangle$ para algún índice i y h . Como esperamos, uno no puede discernir entre partículas idénticas a partir de la medición de sus energías cinéticas colectivas. Por el contrario, cuando se utiliza Eq. (2.7), la energía cinética colectiva de cada partícula puede ser diferente.

2.2.2. Resumen de las trayectorias de muchas partículas

En la mecánica de Bohm[83, 54, 84, 85], cada partícula del sistema está representado por una trayectoria guiada por una onda. La onda es la función de onda de muchas-partículas que se discutió anteriormente, $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$, con todas sus dificultades computacionales. Dicha función de onda cumple la ecuación de continuidad, escrito en la Eq. (2.3), que relaciona la densidad de corriente y probabilidad presente. De tal ecuación de continuidad, uno puede fácilmente[89] definir una velocidad (Bohmian) $\vec{v}_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$ en cada posición del espacio de configuración como:

$$\vec{v}_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) = \frac{\vec{J}_{\vec{r}_i}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)}{|\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)|^2}. \quad (2.9)$$

La trayectoria (Bohmian) de la i -partícula, $\vec{r}_i^j[t]$, en el espacio real puede ser definida por la integración de tiempo de la Eq. (2.9) como:

$$\vec{r}_i^j[t] = \vec{r}_i^j[t_o] + \int_{t_o}^t \vec{v}_j^i(\vec{r}_1^j[t'], \dots, \vec{r}_N^j[t'], t') dt'. \quad (2.10)$$

Obviamente, uno tiene que seleccionar la posición inicial $\vec{r}_i^j[t_o]$ para especificar perfectamente la trayectoria. El super-índice $j = 1, \dots, M$ tiene en cuenta las $M \rightarrow \infty$ posibles posiciones iniciales que se pueden seleccionar. Matematicamente, M deber ser infinito, pero para nuestros calculos numericos será suficienete que sea lo suficientemente grande para que los resultados ensembles no varien cuando añadimos mas trayectorias. Nos referimos a $\vec{r}_i^j[t]$ como la trayectoria de Bohm en \mathbf{R}^3 , mientras nos referiremos a $\{\vec{r}_1^j[t], \dots, \vec{r}_N^j[t]\}$ como trayectorias Bohmianas de muchas-partículas (o N-partículas) en \mathbf{R}^{3N} .

La propiedad relevante de estas trayectorias Bohmianas que hace que sean muy atractivas para los cálculos cuánticos es el hecho de que, por construcción, un conjunto apropiado de ellos (con diferentes posiciones iniciales) reproducen exactamente la evolución temporal de la función de onda de muchas partículas, en cualquier tiempo. Un colectivo adecuado

significa que las posiciones iniciales, $\{\vec{r}_1^d[0] \dots \vec{r}_N^d[0]\}$, se seleccionan de acuerdo con la distribución de probabilidad $|\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, 0)|^2$. Esta última condición es llamada "hipótesis de equilibrio cuántico" [83, 90].

Ahora podemos deducir una propiedad importante de estas trayectorias que será relevante a lo largo de este capítulo. Dado que $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$ es una función de onda de una partícula en algún sistema (puro), la velocidad de Bohm calculado a partir de la Eq. (2.9) en cada punto del espacio de configuración es único. Esto significa que si dos trayectorias coinciden en algún punto del espacio de configuración, entonces, ellas coincidirán en cualquier momento. Este resultado se puede resumir en una frase sencilla: **dos trayectorias Bohmianas de muchas partículas (con diferentes posiciones iniciales) no se cruzan en el espacio de configuración, ya sea para los bosones, los fermiones o partículas no idénticos** [91].

De manera equivalente, las trayectorias Bohmianas definidas en la Eq. (2.10) se pueden obtener mediante la introducción de la forma polar de la función de onda de muchas-partículas $\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) = R(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)e^{iS(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)/\hbar}$ dentro de la Eq. (2.2). El módulo $R \equiv R(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$ y el ángulo $S \equiv S(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$ son funciones reales. Entonces, se obtiene de nuevo, desde la parte imaginaria de la Eq. (2.2), la ecuación de continuidad se definida en (2.3) en forma polar:

$$\frac{\partial R^2}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} \left(R^2 \frac{1}{m} \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} S \right) = 0, \quad (2.11)$$

donde reconocemos la velocidad del i -ésima partícula como:

$$\vec{v}_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) = \frac{1}{m} \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} S(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t). \quad (2.12)$$

Por construcción [54], la definición de velocidad en la Eq. (2.12) es idéntica a la de la Eq. (2.9). Por otro lado, la parte real de la ecuación Schrödinger conduce a una versión de muchas-partículas de la ecuación cuántica de Hamilton - Jacobi:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) + \sum_{i=1}^N (K_i + Q_i) = 0, \quad (2.13)$$

donde hemos definido la energía cinética de Bohm (local) como

$$K_i \equiv K_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) = \frac{1}{2} m \vec{v}_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)^2, \quad (2.14)$$

y la energía potencial cuántica (local):

$$Q_i \equiv Q_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\vec{\nabla}_{\vec{r}_i}^2 R(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)}{R(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)}. \quad (2.15)$$

Cuando se trata de trayectorias Bohmianas, la energía cinética colectiva definida en la Eq. (2.8) se divide en dos partes, $\langle \hat{T}_i \rangle = \langle \hat{K}_i \rangle + \langle \hat{Q}_i \rangle$. La primera parte:

$$\langle \hat{K}_i \rangle = \int \dots \int R^2 K_i dx_1 \dots dx_N \quad (2.16)$$

relacionado con la Energía cinética (Bohmian) local $K_i \equiv K_i(x_1, \dots, x_N, t)$. La segunda parte:

$$\langle \hat{Q}_i \rangle = \int \dots \int R^2 Q_i dx_1 \dots dx_N \quad (2.17)$$

para la energía del potencial cuántico $Q_i \equiv Q_i(x_1, \dots, x_N, t)$.

Propiedades de las trayectorias Bohmianas de muchas partículas con interacción de intercambio

Ahora, podemos enumerar una serie de propiedades importantes para los conjuntos de trayectorias Bohmianas que representa partículas idénticas, es decir, cuando la interacción de intercambio está presente. Con el fin de simplificar la notación, se define $\vec{X} = \{\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N\}$ y la N-partícula trayectoria de Bohm en el momento $t = 0$ as $\vec{X}^j[0] = \{\vec{r}_1^j[0], \dots, \vec{r}_N^j[0]\}$. Cuando se intercambian las posiciones iniciales de dos trayectorias, $\vec{r}_i^j[0]$ y $\vec{r}_h^j[0]$, manteniendo el resto sin cambios, se obtiene la un nuevo f -conjunto de trayectorias $\vec{X}^f[0] = \{., \vec{r}_h^j[0], ., \vec{r}_i^j[0], .\}$. Debido a la Eq. (2.4), el módulo de la función de onda de muchas partículas satisface:

$$R(\vec{X}, 0)|_{\vec{X}=\vec{X}^j[0]} = R(\vec{X}, 0)|_{\vec{X}=\vec{X}^f[0]}, \quad (2.18)$$

y el ángulo satisface:

$$S(\vec{X}, 0)|_{\vec{X}=\vec{X}^j[0]} = \gamma + S(\vec{X}, 0)|_{\vec{X}=\vec{X}^f[0]} \quad (2.19)$$

donde $\gamma = 0 \pmod{2\pi}$ para bosones (simétrico) y $\gamma = \pi \pmod{2\pi}$ para fermiones (antisimétrico). De hecho, ya que la definición de $t = 0$ para las trayectorias Bohmianas es arbitraria, los requisitos establecidos en la Eq. (2.18) y la Eq. (2.19) se satisfacen en cualquier momento t . La propiedad de la Eq. (2.19) implica:

$$\vec{v}_i(\vec{X}, t)|_{\vec{X}=\vec{X}^j[t]} = \vec{v}_h(\vec{X}, t)|_{\vec{X}=\vec{X}^f[t]}. \quad (2.20)$$

Esta condición de las velocidades de Bohm, que es válida para bosones o fermiones, tiene dos consecuencias importantes. En primer lugar, vamos a comparar los dos conjuntos de trayectoria de muchas partículas con diferentes posiciones iniciales antes mencionados: el j -conjunto y el f -conjunto. Su diferencia es sólo $\vec{r}_i^j[0] = \vec{r}_h^f[0] = \vec{a}$ y $\vec{r}_h^j[0] = \vec{r}_i^f[0] = \vec{b}$. Entonces, nos damos cuenta, debido a Eq. (2.20), que todas las trayectorias Bohmianas con condiciones iniciales idénticas serán iguales independientemente de las condiciones iniciales, excepto las dos trayectorias que tienen sus posiciones iniciales intercambiarse. Por estas trayectorias, obtenemos $\vec{r}_i^j[t] = \vec{r}_h^f[t]$ y $\vec{r}_h^j[t] = \vec{r}_i^f[t]$.

La segunda consecuencia de la Eq. (2.20) es válido para aquellas trayectorias de muchas partículas que tienen, al menos, dos de sus componentes iguales $\vec{r}_i^j[0] = \vec{r}_h^j[0] = \vec{a}$. Debido a esta coincidencia, tenemos $\vec{X}^j[0] = \{., \vec{a}, ., \vec{a}, .\}$ y también $\vec{X}^f[0] = \{., \vec{a}, ., \vec{a}, .\}$. En realidad, ahora, los dos conjuntos de trayectorias son los mismos. Entonces, la condición $\vec{v}_i(\vec{X}, t)|_{\vec{X}=\vec{X}^j[t]} = \vec{v}_h(\vec{X}, t)|_{\vec{X}=\vec{X}^f[t]}$ se puede escribir como:

$$\vec{v}_i(\vec{X}, 0)|_{\vec{X}=\vec{X}^j[0]} = \vec{v}_h(\vec{X}, 0)|_{\vec{X}=\vec{X}^j[0]} = \vec{v}_a, \quad (2.21)$$

porque $\vec{X}^j[0] = \vec{X}^f[0]$. Entonces, la trayectoria $\vec{r}_i^j[t]$ en el momento subsiguiente $0 + dt$ es $\vec{r}_i^j[0 + dt] = \vec{a} + \vec{v}_a dt$ es idéntica a la trayectoria $\vec{r}_h^j[0 + dt] = \vec{a} + \vec{v}_a dt$. Este resultado, es válido en cualquier momento, $\vec{r}_i^j[t] = \vec{r}_h^j[t]$. Debido a esta propiedad y la propiedad que trayectorias Bohmianas no se cruzan en el espacio de configuración [91], tenemos un corolario importante. Definimos trayectorias “diagonales” como esas trayectorias (many-partículas) donde al menos dos componentes, $\vec{r}_i^j[t] = \vec{r}_h^j[t]$, son idénticos. El resto de componentes puede ser diferente. Vemos que otras trayectorias Bohmianas no pueden cruzar tales “diagonales”, por lo tanto, todas las otras trayectorias Bohmianas se limitan a permanecer en subespacios de la espacio de configuración. Esta misma idea se puede explicar según la Ref. [92]: la mecánica Bohmiana para partículas idénticas puede ser descrita en un espacio reducido” \mathbf{R}^{3N}/S_N , con S_N el espacio de permutación de N – partículas. El resto de trayectorias en otras regiones de \mathbf{R}^{3N} no se considera en el espacio reducido” \mathbf{R}^{3N}/S_N , ya que son idénticas a las anteriores después de una permutación adecuada de las posiciones.

Por último, queremos aclarar el significado de partículas distinguibles e indistinguibles cuando se habla de interacción de intercambio. Una reclamación estándar en muchos libros de texto de la mecánica cuántica es que las partículas idénticas, por ejemplo, dos electrones con una función de onda antisimétrica orbital, son indistinguibles. Se afirma que si las partículas tendrían trayectorias, serían automáticamente distinguibles. En la mecánica de Bohm, incluso con el postulado de simetrización, el adjetivo indistinguibles es inapropiado. Una etiqueta la trayectoria de la partícula 1 como $\vec{r}_1^j[t]$ y la de partículas 2 como $\vec{r}_2^j[t]$. Por lo tanto, obviamente, uno es capaz de distinguir perfectamente en los cálculos. Sin embargo, hemos demostrado que, por construcción, las trayectorias Bohmianas tienen requisitos especiales de simetría. En particular, todos los resultados para partículas 1 calculadas a partir de un conjunto de estas trayectorias serán idénticas a las calculadas por 2. En palabras simples, para un sistema de partículas idénticas, las trayectorias Bohmianas son distinguibles, mientras que los resultados observables asociados a diferentes partículas no se pueden distinguir.

Ejemplo: El efecto de la interacción de intercambio sobre las trayectorias Bohmianas

Vamos a discutir, con algunos ejemplos numéricos, las propiedades anteriores de las trayectorias Bohmianas de partículas idénticas. En todos los ejemplos numéricos de este apartado, se considera que las partículas se propaga libremente en el espacio. Los dos paquetes de onda que se utilizarán para la construcción de la función de onda de muchas

partículas se definen a partir de la Eq. (2.5). En las siguientes secciones consideraremos dos electrones en un espacio físico 1D: Uno a la izquierda con momento negativo y otro a la derecha con momento positivo. Por lo tanto, los paquetes están inicialmente separados, después sufren interferencias cuando ocupan posiciones comunes, y finalmente vuelven a separarse. Ver Fig. 2.1

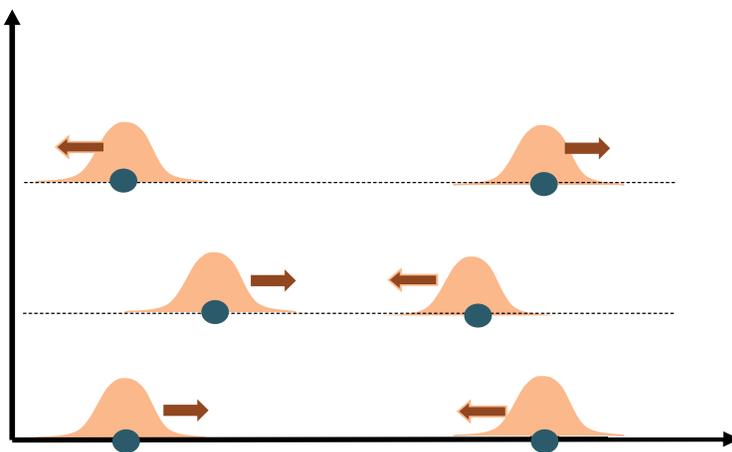


Figura 2.1: Evolución temporal de dos paquetes de onda.

En primer lugar, consideramos que dos electrones no idénticos a través de una función de onda de dos partículas $\Psi(x_1, x_2, t)$ calculado a partir de la Eq. (2.7), sin ningún tipo de simetría. Ver el módulo inicial de la función de onda de 2-partícula en Fig. 2.2. En particular, consideramos $E_{o1} = 0,12$ eV, $x_{o1} = -50$ nm y $\sigma_x = 25$ nm para el primer paquete de ondas (izquierda inicialmente), y $E_{o2} = 0,08$ eV, $x_{o1} = 50$ nm y $\sigma_x = 25$ nm para el segundo (derecha inicialmente). Con el fin de ver la interacción espacial de las dos partículas, el impulso de la primera partícula es positivo y la de la segunda negativa. Consideramos que una masa de electrones libres para ambos electrones. Una vez que sabemos $\Psi(x_1, x_2, t)$, calculamos la trayectoria Bohmiana (de dos partículas) de la Eq. (2.10) con diferentes posiciones iniciales. Como se ve en la Fig. 2.3, las trayectorias se corresponden con líneas más o menos paralelas. En Fig. 2.4, nos muestra que el potencial cuántico de cualquiera de las partículas, primera o segunda, es casi cero. El la energía cinética (Bohmiana) se mantiene casi igual a su valor inicial, 0,12 eV para el primer paquete de ondas en línea con círculo sólido (azul) y 0,08 eV para el segundo en la línea (azul). La energía total (verde) permanece constante e igual a 0,2 eV, es decir, la suma de las energías cinéticas individuales. Estas trayectorias Bohmianas para partículas no idénticos se mueven más o menos como partículas clásicas.

A continuación, se considera una función de onda $\Psi(x_1, x_2, t)$ de dos electrones idénticos calculados a partir del determinante de Slater de la Eq. (2.6) para $N = 2$ con los mismos dos paquetes iniciales de onda gaussianos discutidos anteriormente. En Fig. 2.2.2, graficamos

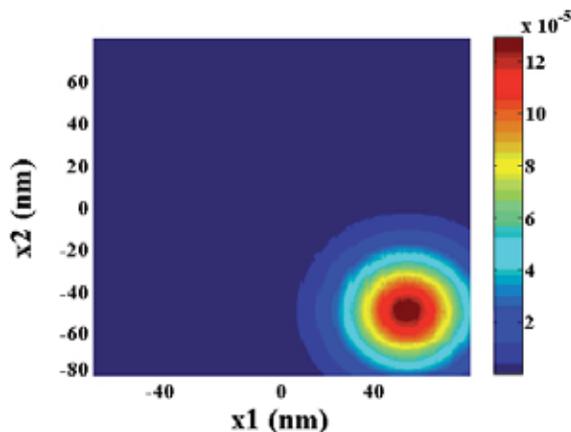


Figura 2.2: (Color en línea) Modulos de la función de onda para dos no idénticas partículas en la 2D espacio de configuración en $t = 0$ fs.

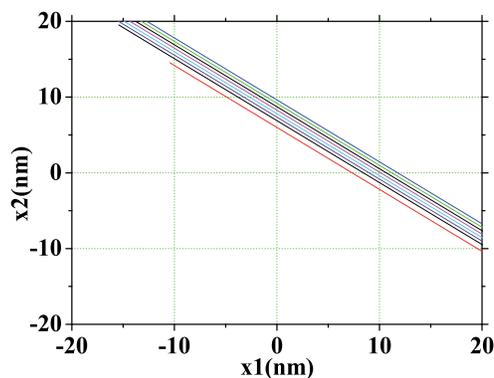


Figura 2.3: (Color en línea) Dos partículas trayectorias Bohmianas con diferentes condiciones iniciales para las partículas que no son idénticos en el espacio libre.

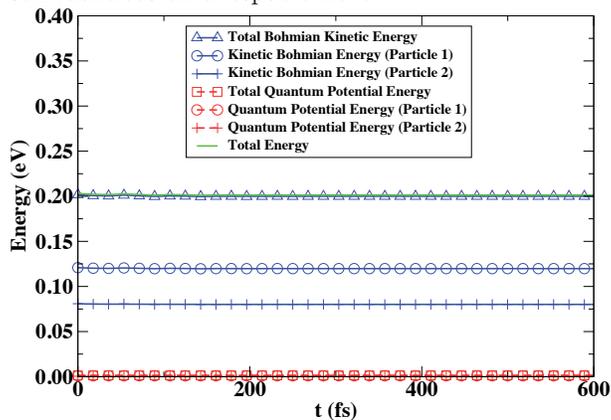


Figura 2.4: (Color en línea) Evolución temporal de las energías totales e individuales del sistema de dos electrones no idéntico en el espacio libre. Total: sólido (verde) de la línea de energía total, el triángulo relleno (azul) de la energía cinética de Bohm total, ajusta discontinua (rojo) de la línea total de energía potencial cuántico. Partícula individual 1: círculo sólido (azul) de la línea de energía cinética de Bohm, círculo discontinuo (rojo) de la línea de energía potencial cuántico. Partícula individual 2: más sólido (azul) de la línea de energía cinética de Bohm, de trazos más (rojo) de la línea de energía potencial cuántico.

el módulo de las funciones de onda de muchas partículas en $t = 267,8$ fs. En particular, obtenemos $\Psi(\vec{a}, \vec{a}, t) = 0$ en la diagonal. En la Fig. 2.5, trazamos la evolución temporal de las trayectorias Bohmianas. En primer lugar, se observa que $x_1^j[t] = x_2^f[t]$ y $x_2^j[t] = x_1^f[t]$ cuando $x_1^j[0] = x_2^f[0] = a$ y $x_2^j[0] = x_1^f[0] = b$. Como se discutió en Sec. 2.2.2, las trayectorias Bohmianas correspondientes a las posiciones iniciales intercambiados se vuelven simétrica con respecto a los puntos diagonales del espacio de configuración. En segundo lugar, se observa que las trayectorias Bohmianas no cruzan esa diagonal.

En Fig. 2.6, trazamos las energías del sistema de fermiones de dos partículas. La energía total de las partículas idénticas es idéntica a la de las partículas no idénticos discutidos en Fig. 2.4. La razón es que el momento (velocidad) de los paquetes de onda son muy diferentes. Un impulso es positivo y el otro negativo y no hay ningún efecto Pauli en la energía (como se discutirá con mas detalle en el siguiente capítulo). Sin embargo, las trayectorias Bohmianas son “reflejada” en la diagonal, su velocidad cero en esa diagonal. Entonces, la media de energía cinetica Bohmiana $K_i(x_1, x_2, t)$ segun la Eq. (2.16) es casi cero, mientras que la media de conjunto de $Q_i(x_1, x_2, t)$ crece para mantener constante la energía total. El mismo resultado se puede argumentar señalando que el potencial cuántico en la Eq. (2.15) depende de la curvatura del módulo, y este se vuelve grande en la que los puntos mencionados debido a la interferencia. Además, contrariamente a las dos partículas no idénticos discutido en Fig. 2.4, las energías de la primera partícula son idénticos a los de la segunda partícula. Como hemos dicho anteriormente, los resultados observables de la energía de las partículas individuales son indistinguibles, aunque podemos distinguir perfectamente las trayectorias en Fig. 2.5. Finalmente, en Fig. 2.2.2 trazamos el mismo resultado que en Fig. 2.2.2 para dos bosones idénticos. Utilizamos exactamente los mismos parámetros para los paquetes de onda discutidos en las figuras anteriores. La única diferencia es que la función de onda inicial se calcula a partir de la Eq. (2.6) cuando el $sign(\vec{p}_i)$ está sustituido por 1. Notemos de nuevo la propiedad simétrica de los módulos de que la función de onda en el espacio de configuración en tiempo de $t = 178,5$ fs. Aunque tenemos $\Psi(a, a, t) \neq 0$ en la diagonal. Vemos en Fig. 2.5 que las trayectorias Bohmianas no cruzan esa diagonal. Este es un resultado esperado, porque nuestras discusiones sobre las propiedades de las trayectorias Bohmianas en Sec. 2.2.2 no dependen de la naturaleza bosonic o fermiónica de partículas. Hay una trayectoria de Bohm que “vive” en los puntos diagonales del espacio de configuración (no graficados) que no permita que las otras trayectorias puedan cruzar esa línea. Una vez más, las trayectorias son simétricas en el marco del intercambio de posiciones iniciales. Por lo tanto, sólo la mitad del espacio de configuración se vuelve realmente relevante, la otra mitad es sólo una imagen especular. En Fig. 2.6, trazamos las energías del sistema bosonic de dos partículas. Los resultados numéricos de los de energía cinética (Bohmiana) para los bosones son ligeramente inferiores a los fermiones cuando el paquete de ondas se encuentra cerca de la diagonal del espacio de configuración. La razón es porque hay trayectorias Bohmianas (más bosónicas) que llegan más cerca de la diagonal en Fig. 2.5 que las trayectorias fermiónicas en Fig. 2.5.

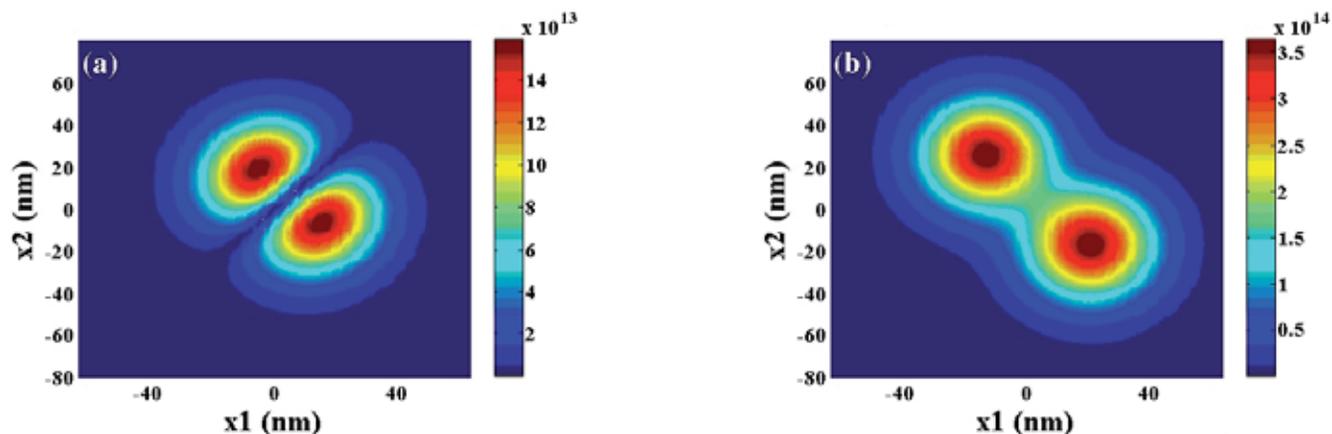


Figura 2.5: (Color en línea) Módulo de la función de onda para dos idénticos (a) fermión y (b) las partículas bosón en el espacio de configuración 2D en (a) $t = 267,8$ fs y (b) $t = 178,5$ fs.

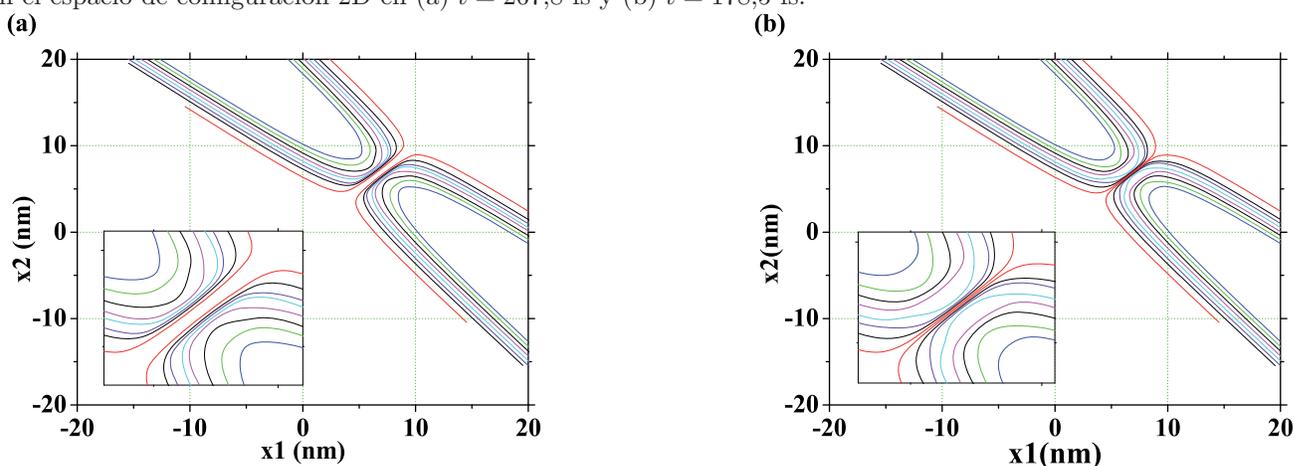


Figura 2.6: (Color en línea) Dos partículas trayectorias Bohmianas con diferentes condiciones iniciales idénticas para (a) fermiones y (b) bosones las partículas en el espacio libre. La inserción es un zoom de las propiedades no cruce en diagonal.

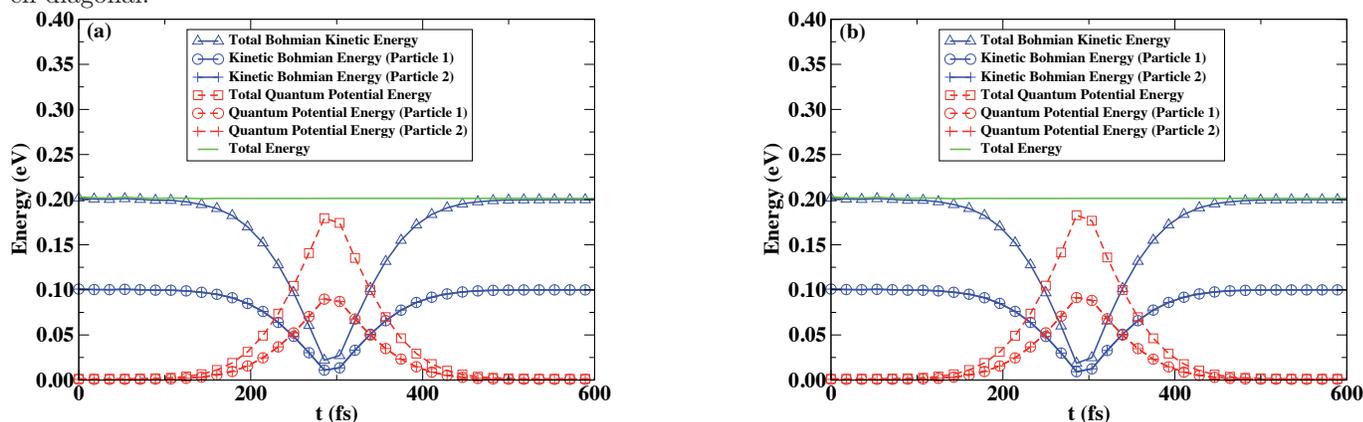


Figura 2.7: (Color en línea) Evolución temporal de las energías totales e individuales de dos electrones idénticos (a) fermion y (b) boson en el espacio libre. Total: línea sólida (verde) energía total, triangulo sólido (azul) total energía cinetica de Bohm, línea entre cortada y cuadrado (rojo) energía potencial cuántica total. Partícula individual 1: círculo sólido (azul) energía cinetica de Bohm, línea entre cortada y círculo (rojo) energía potencial cuántica. Partícula individual 2: línea sólida y (+) (azul) energía cinetica de Bohm, línea entrecortada y (+) (rojo) energía potencial

2.3. Trayectorias de muchas-partículas sin Funciones de onda de muchas-partículas

Como hemos comentado en la introducción, muchos intentos se han desarrollado en la literatura para ofrecer soluciones precisas al problema de muchos cuerpos. En primer lugar, se revisan brevemente una de estas aproximaciones presentadas en Ref. [86]. A continuación, se explica cómo la interacción de intercambio se puede incluir en la aproximación mencionada.

2.3.1. La función de onda condicional

La idea principal detrás de la aproximación de muchos cuerpos que se menciona en Ref. [86] es el hecho de que el cálculo de la velocidad de Bohm para la trayectoria $\vec{r}_a[t]$ calculada a partir de la Eq. (2.9) sólo requiere un derivada espacial de $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_a, \dots, \vec{r}_N, t)$ sobre la dirección \vec{r}_a , y no sobre el resto de grados de libertad. Entonces, en principio, la trayectoria $\vec{r}_a[t]$ puede ser equivalente calculada a partir de la función de onda de muchos cuerpos $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$ o de la siguiente función de onda condicional:

$$\Psi_a(\vec{r}_a, t) = \Psi(\vec{r}_a, \vec{X}_b[t], t), \quad (2.22)$$

donde $\vec{X}_b[t] = \{\vec{r}_1[t], \vec{r}_{a-1}[t], \vec{r}_{a+1}[t], \vec{r}_N[t]\}$ es un vector que contiene todas las trayectorias Bohmianas exceptuando $\vec{r}_a[t]$. De forma idéntica, utilizaremos $\vec{X}_b = \{\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{a-1}, \vec{r}_{a+1}, \dots, \vec{r}_N\}$ cuando se hace referencia a todos los grados de libertad, excepto \vec{r}_a . Siempre, no sea relevante evitaremos el superíndice j en la trayectoria de Bohm que especifica las posiciones iniciales de la trayectoria. Ciertamente, la función de onda condicional en la Eq. (2.22) “vive” en un espacio de configuración mucho más pequeño, \mathbf{R}^3 , que la función de onda de muchos cuerpos. Por lo tanto, en principio, la función de onda condicional necesita mucho menos esfuerzo computacional que la función de onda de muchas partículas. Siguiendo la Ref. [86] la función de onda de una sola partícula, $\Psi_a(\vec{r}_a, t)$ que vamos a utilizar para calcular $\vec{r}_a[t]$, se puede obtener como una solución de la ecuación de Schrödinger de una sola partícula:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_a(\vec{r}_a, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{r}_a}^2 + U_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b[t], t) + G_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b[t], t) + i \cdot J_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b[t], t) \right) \Psi_a(\vec{r}_a, t) \quad (2.23)$$

La definición exacta de los términos $U_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b, t)$, $G_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b, t)$ y $J_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b, t)$ se puede encontrar en Ref. [86]. Aquí, hacemos hincapié en las propiedades simétricas de estos potenciales. El intercambio de \vec{r}_i por \vec{r}_h debe implicar, para los tres potenciales, que siguen teniendo idéntico valor. Como ya hemos comentado, se trata de una condición que ya se ha incorporado en la forma del potencial $U_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b, t)$, si este potencial debe ser válido para partículas idénticas. Además, hemos mostrado en la Eq. (2.18) y la Eq. (2.19) que cualquier derivada espacial o temporal de las funciones $R(\cdot, \vec{r}_i, \cdot, \vec{r}_h, \cdot, t)$ y $S(\cdot, \vec{r}_i, \cdot, \vec{r}_h, \cdot, t)$ permanece sin cambios con respecto a permutaciones de posiciones. Entonces, a partir de las

definiciones exactas de los potenciales $G_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b, t)$ y $J_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b, t)$ en Ref. [86], fácilmente nos damos cuenta de que los dos se mantienen sin cambio bajo las permutaciones de partículas.

Para cada trayectoria $\vec{r}_a[t]$ con $a = 1, \dots, N$, tenemos que resolver una Eq. (2.23). En resumen, hemos sido capaces de descomponer una irresoluble ecuación de Schrödinger de N -partículas dentro de un conjunto de N ecuaciones de Schrödinger de una sola partícula con potenciales dependientes del tiempo[86]. En este punto nos damos cuenta de que la simplificación numérica extraordinario se produce en el precio que hay términos en la Eq. (2.23) que son desconocidos y necesitan aproximaciones pertinentes, $G_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b[t], t)$ y $J_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b[t], t)$ en la Eq. (2.23). Esta es una situación similar a la de la DFT discutido en la introducción de este capítulo.

2.3.2. Algoritmo para incluir interacción de intercambio en trayectorias Bohmianas de muchas partículas

Uno puede tratar de proporcionar aproximaciones de los términos $G_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b[t], t)$ y $J_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b[t], t)$ con el fin de incorporar la interacción de intercambio entre las partículas directamente en la Eq. (2.23). Sin embargo, desde un punto de vista computacional, una aproximación a estos términos parece bastante difícil. Por ejemplo, en un sistema de fermiones, hemos visto que la función de onda $\Psi_a(\vec{r}_a, t) = \Psi(\vec{r}_1[t], \dots, \vec{r}_{a-1}[t], \vec{r}_a, \vec{r}_{a+1}[t], \dots)$ se convierte en cero en todas partes en que \vec{r}_a es igual a la posición de otra trayectoria. En estas posiciones, debido a su dependencia de la inversa del módulo, obtendríamos $G_a(\vec{r}_a = \vec{r}_k[t], \vec{X}_b[t], t) \rightarrow \pm\infty$ y $J_a(\vec{r}_a = \vec{r}_k[t], \vec{X}_b[t], t) \rightarrow \pm\infty$. Además, no es del todo claro cómo podemos garantizar que los resultados observables para la partícula 1 son idénticos a los de la partícula 2. En este apartado se presenta una estrategia diferente que capturará el intercambio de interacción evitando las dificultades anteriores. La idea se puede explicar en tres pasos.

El primer paso es desarrollar una expresión para $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$ como una suma de funciones de onda sin simetría. Por ejemplo, vamos a definir $\Psi_{ns}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$ como una función de onda de muchas partículas sin ninguna simetría (bosonic o fermiónica). Hacemos hincapié en que Ψ_{ns} puede ser una función de onda no separable. Entonces, podemos construir la función de onda antisimétrica (fermiones) utilizando una suma de $\Psi_{ns}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$ con permutaciones de posiciones:

$$\Psi = C \sum_{l=1}^{N!} \Psi_{ns}(\vec{r}_{p(l)_1}, \dots, \vec{r}_{p(l)_N}, t) \text{sign}(\vec{p}(l)), \quad (2.24)$$

La suma es sobre todos, $l = 1, \dots, N!$ permutaciones, $\vec{p}(l) = \{p(l)_1, p(l)_2, \dots, p(l)_N\}$. Para bosones, la función de onda simétrica que puede construirse siguiendo pasos idénticos pero sustituyendo $\text{sign}(\vec{p}(l))$ por 1. Destaquemos que cada término $\Psi_{no-sym}(\vec{r}_{p(l)_1}, \vec{r}_{p(l)_2}, \dots, \vec{r}_{p(l)_N}, t)$ es también es una solución de una ecuación de Schrödinger muchas partículas y sin requisitos especiales de intercambio de simetría. Entonces, la función de onda condicional $\Psi_a(\vec{r}_a, t)$

de la Eq. (2.24) puede ser escrita como:

$$\Psi_a(\vec{r}_a, t) = C \sum_{l=1}^{N!} \Psi_{ns}(\vec{r}_{p(l)_1}[t], \dots, \vec{r}_{p(l)_j}, \dots, \vec{r}_{p(l)_N}[t], t) \times \text{sign}(\vec{p}(l)). \quad (2.25)$$

El segundo paso es la solución de cada función de onda $\Psi_{ns}(\vec{r}_{p(l)_1}[t], \dots, \vec{r}_{p(l)_j}, \dots, \vec{r}_{p(l)_N}[t], t)$ presente en la Eq. (2.25) como una solución de la Eq. (2.23). En general, el termino $G_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b[t], t)$ puede ser dividido en una parte con una dependencia explicita sobre \vec{r}_a y una parte sin tal dependencia, $G_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b[t], t) = G'_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b[t], t) + G''_a(\vec{r}_a[t], \vec{X}_b[t], t)$. Lo mismo para $J_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b[t], t)$. Además sabemos que los términos puramente dependientes del tiempo $G''_a(\vec{r}_a[t], \vec{X}_b[t], t)$ y $J''_a(\vec{r}_a[t], \vec{X}_b[t], t)$ en el Hamiltoniano de la Eq. (2.23) sólo introducen un ángulo (numero complejo) que solo dependnde del tiempo, no de la posición. Entonces, podemos escribir $\Psi_{ns} \equiv \Psi_{ns}(\vec{r}_{p(l)_1}[t], \dots, \vec{r}_{p(l)_j}, \dots, \vec{r}_{p(l)_N}[t], t)$ como:

$$\Psi_{ns} = \tilde{\psi}_{p(l)_j,a}(\vec{r}_a, t) \exp(z_{p(l)_j,a}(t)), \quad (2.26)$$

donde el término $z_{p(l)_j,a}(t)$ es el término (complejo) puramente dependiente del tiempo relacionado con $G''_a(\vec{r}_a[t], \vec{X}_b[t], t) + J''_a(\vec{r}_a[t], \vec{X}_b[t], t)$. La función de onda $\tilde{\psi}_{p(l)_j,a}(\vec{r}_a, t)$ es solución de la Eq. (2.23) sin considerar explícitamente el termino $G''_a(\vec{r}_a[t], \vec{X}_b[t], t)$ y $J''_a(\vec{r}_a[t], \vec{X}_b[t], t)$. el subíndice a en $\tilde{\psi}_{p(l)_j,a}(\vec{r}_a, t)$ especifica cuáles son los potenciales $U_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b[t], t)$, $G'_a(\vec{r}_a[t], \vec{X}_b[t], t)$ y $J'_a(\vec{r}_a[t], \vec{X}_b[t], t)$ utilizado en la resolución de la Eq. (2.23). El otro subíndice $p(l)_j$ identifica la función de onda inicial. Cuando se trata con el transporte cuántico, podemos asumir que la función de onda inicial de muchas partículas se encuentra lejos de la zona activa (en una región de espacio libre) donde se puede escribir como un determinante de Slater, como en la Eq. (2.6). Entonces, podemos darnos cuenta fácilmente que la definición del estado inicial $\tilde{\psi}_{p(l)_j,a}(\vec{r}_a, 0)$ es un paquete particular de ondas en la Eq. (2.5) que cumple $p(l)_j = a$. Ver Refs. [54] y [93].

El tercer paso, una vez que conocemos todas las funciones de onda $\tilde{\psi}_{p(l)_j,a}(\vec{r}_a, t)$, es el cálculo de la función de onda de muchas partículas $\Psi_a(\vec{r}_a, t) = \Psi(\vec{r}_1[t], \dots, \vec{r}_{a-1}[t], \vec{r}_a, \vec{r}_{a+1}[t], \dots)$ en la Eq. (2.25) como:

$$\Psi_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b[t], t) = C \sum_{l=1}^{N!} \tilde{\psi}_{\vec{p}(l),a}(\vec{r}_a, t) \times \exp(z_{\vec{p}(l),a}(t)) \text{sign}(\vec{p}(l)). \quad (2.27)$$

Tenemos que especificar los valores de los ángulos desconocidos $z_{p(l)_j,a}(t)$. Solucionaremos estos ángulos tratando de satisfacer los requisitos de simetría de las trayectorias Bohmianas discutidos en Sec. 2.2.2. En particular, nosotros exigimos que los resultados observables asociados a diferentes partículas sean indistinguibles. Los siguientes ángulos $z_{\vec{p}(l),a}(t)$ cumplen la condición de simetría anterior:

$$\exp(z_{\vec{p}(l),a}(t)) = \prod_{k=1, k \neq a}^N \tilde{\Psi}_{p(l)_j,a}(\vec{r}_k[t], t). \quad (2.28)$$

En el A se ha demostrado que esta condición es suficiente para garantizar que los resultados individuales no dependen de si medimos la partícula 1 o al 2.

Es importante recordar que estamos resolviendo un sistema no separables. La función de onda $\tilde{\psi}_{p(l)_j,a}(\vec{r}_a, t)$ no sólo depende de la función de onda inicial $\psi_j(\vec{r}_a, 0)$, sino también del resto de trayectorias Bohmianas. Dado que los términos sobre el potencial $U_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b[t], t)$, $G'_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b[t], t)$ y $J'_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b[t], t)$ son invariantes bajo el intercambio de trayectorias diferentes que $\vec{r}_a[t]$, hay muchos $\Psi_{no-sym}(\vec{r}_{p(l)_1}[t], \dots, \vec{r}_{p(l)_j}[t], \dots, \vec{r}_{p(l)_N}[t], t)$ que tienen potenciales idénticos. Entonces, nosotros no tenemos que calcular $N! \times N$ funciones de onda $\tilde{\psi}_{p(l)_j,a}(\vec{r}_a, t)$, pero solo $N \times N$ diferentes funciones de onda $\tilde{\psi}_{j,a}(\vec{r}_a, t)$ con $j = 1, \dots, N$ haciendo referencias a diferentes potenciales y $a = 1, \dots, N$ a diferentes paquetes de onda.

Finalmente, queremos notar que el algoritmo para la inclusión de la interacción de intercambio es universal en el sentido de que es idéntico para cualquier sistema. Sin embargo, como ya hemos mencionado, necesitamos todavía aproximaciones para los términos de los términos desconocidos $G_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b[t], t)$ and $J_a(\vec{r}_a, \vec{X}_b[t], t)$.

2.3.3. Test para potenciales armónicos no separables

A continuación, con el fin de clarificar la explicación del algoritmo discutido en el apartado anterior y poner a prueba su precisión, se aplica éste a un sistema simple de dos electrones con espines idénticos bajo hamiltonianos no separables. Consideramos que el espacio real \mathbf{R} para cada electrón, mientras que el espacio de configuración es un \mathbf{R}^2 . Entonces, la función de onda exacta de 2 electrones $\Psi(x_1, x_2, t)$ puede ser resuelto exactamente desde la Eq. (2.2) con $N = 2$ y la energía potencial:

$$U(x_1, x_2) = F(x_1 - x_2)^2, \tag{2.29}$$

donde el factor F nos permitirá modificar arbitrariamente la fuerza de la interacción no separable. Una vez que conocemos la función de onda 2D exacta, $\Psi(x_1, x_2, t)$, podemos calcular las trayectorias Bohmianas 2D con bastante facilidad utilizando la Eq. (2.9).

Alternativamente, podemos calcular estas trayectorias sin conocer la función de onda de muchas partículas, pero el cálculo de la función de onda condicional $\Psi_a(x_a, t)$ solución de la Eq. (2.23).

Se estudia primero el sistema de dos electrones no idénticos (con espines paralelos). Entonces, el cálculo de la función de onda condicional para el primero de partículas y para la segunda partícula se puede calcular directamente desde la Eq. (2.23) con la aproximación adecuada para los términos G_a y J_a de la Sec. 2.3.1. En este sentido, consideramos una aproximación de orden cero en un desarrollo de Taylor alrededor $x_a[t]$ para los términos potenciales G_a y J_a . En otras palabras, consideramos estos potenciales como términos puramente dependientes del tiempo, $G_a(x_a, x_b[t], t) \approx G''_a(x_a[t], t)$ y $J_a(x_a, x_b[t], t) \approx J''_a(x_a[t], t)$. Esta es la aproximación más simple para estos terminos. Entonces, como se indica en la Eq. (2.26), el efecto de G_a y J_a sobre la función de onda es la adición de un ángulo complejo (que solo tiene dependencia temporal). Entonces, la Eq. (2.23) se puede simplificar en la

siguiente ecuación para el cálculo de $\Psi_{j,a}(\vec{r}_a, t)$:

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}_{j,a}(x_a, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial^2 x_a} + U_a(x_a, x_b[t]) \right) \tilde{\psi}_{j,a}(x_a, t), \quad (2.30)$$

Los dos índices j y a en $\tilde{\Psi}_{j,a}(\vec{r}_a, t)$ son redundantes cuando se trata de partículas no idénticos, pero son necesarias para los idénticos. Para dos partículas que no son idénticos, la energía potencial puede ser $U_1(x_1, x_2[t]) = F(x_1 - x_2[t])$ para $j = a = 1$ y $U_2(x_2, x_1[t]) = F(x_1[t] - x_2)$ para $j = a = 2$. Las funciones de onda iniciales que tenemos son: $\psi_1(x_1, 0)$ para $j = a = 1$ definida como la Eq. (2.5) y $\psi_2(x_2, 0)$ para $j = a = 2$. En particular, nosotros consideramos $E_{o1} = 0,06$ eV, $x_{o1} = -50$ nm y $\sigma_x = 25$ nm para el primer paquete de onda, y $E_{o2} = 0,04$ eV, $x_{o1} = 50$ nm y $\sigma_x = 25$ nm para el segundo. Finalmente, calculamos $\tilde{\Psi}_{1,1}(\vec{r}_1, t)$ para conseguir la trayectoria $\vec{r}_1[t]$ y $\tilde{\Psi}_{2,2}(\vec{r}_1, t)$ para $\vec{r}_2[t]$. Aquí, los ángulos complejos se vuelven irrelevantes.

En Fig. 2.8, hemos representado los resultados del conjunto de la energía cinética (Bohmiana), de la Eq. (2.16), la energía potencial cuántico, de la Eq. (2.17), para los dos electrones no idénticos. Calculamos los resultados directamente de la solución la función de onda exacta 2D de la Eq. (2.2). Hacemos hincapié en que hay un intercambio de energía cinética entre la primera y la segunda partículas (ver su energía cinética en la primera y segunda oscilacion). Este efecto manifiesta claramente que el hamiltoniano de este sistema cuántico no es separable. En Fig. 2.9, hemos dibujado la misma información pero esta vez utilizando nuestra aproximación 1D de la función de onda condicional, como se explica en Sec. 2.3.1. Para este escenario particular, nuestra aproximación más simple para los términos desconocidos funciona a la perfección y el acuerdo entre la solución 2D exacta y nuestra aproximación 1D es excelente. Hacemos hincapié en que la energía cinética de las primeras y segundas partículas son claramente distinguibles. Calculamos las energías (ensamble) con el fin de justificar que el algoritmo es precisa no sólo para un conjunto seleccionado arbitraria de la trayectoria de Bohm, sino para la mayoría de ellos; y también para comprobar que los resultados para la partícula 1 es indistinguible de los de la partícula 2.

En Fig. 2.10, hemos representado los resultados del conjunto de la (Bohm) la energía cinética, Eq. (2.16), la energía potencial cuántica, Eq. (2.17), calculado directamente a partir de la solución exacta de dos partículas función de onda de 2D de la Eq. (2.2) por dos electrones idénticos (con espines paralelos). En particular, consideramos fermiones con los potenciales y algunos paquetes iniciales de onda que discutimos anteriormente. Ahora, las energías de las partículas 1 y 2 no se pueden distinguir. Además, nos damos cuenta de que el hecho de que las trayectorias Bohmianas no pueden cruzar la diagonal del espacio de configuración, implica una disminución/aumento del (Bohm) Energía cinética / cuántica cuando la función de onda cruza la diagonal. Este es el mismo efecto descrito anteriormente en Sec. 2.2.2.

Por último, calculamos los mismos resultados en Fig. 2.10 con nuestra aproximación 1D de las funciones de onda condicional, siguiendo el algoritmo explicado en Sec. 2.3.2. Ahora, tenemos que calcular 4 distintas funciones, $\tilde{\psi}_{j,a}(x_a, 0)$. La función de onda $\tilde{\psi}_{1,1}(x_1, 0)$

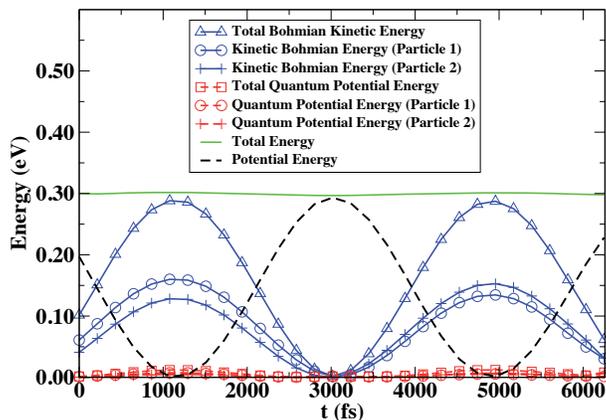


Figura 2.8: (Color en línea) Evolución temporal de las energías totales e individuales (ensemble promedio) de sistema de dos electrones no idéntico bajo potencial no separable. Total: línea sólida (verde) energía total, triángulo sólido (azul) energía cinética total de Bohm, línea entre cortada y cuadrado (rojo) energía potencial cuántica total, línea entre cortada (negro) energía potencial. Partícula individual 1: círculo línea sólida (azul) energía cinética de Bohm, línea entre cortada y círculo (rojo) energía potencial cuántica. Partícula individual 2: línea sólida (+) (azul), línea entre cortada energía cinética de Bohm, línea entre cortada y (+) (rojo) energía potencial cuántica.

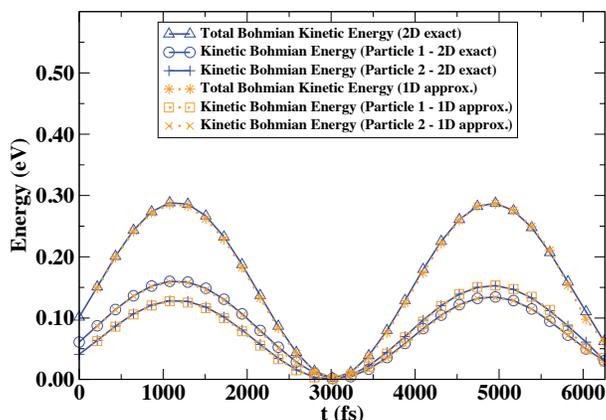


Figura 2.9: (Color en línea) Evolución temporal de las energías totales e individuales (ensemble promedio) de sistema de dos electrones no idéntico bajo potencial no separable. Individual: línea sólida (azul) energía cinética de Bohm de partícula 1 con la solución 2D exacta, línea sólida y (+) (azul) energía cinética de Bohm de la partícula 2 con la solución exacta 2D, línea punteada y cruces (x) (naranja) energía cinética de Bohm de la partícula 1 con una aproximación 1D, líneas punteadas y cuadrados (naranja) energía cinética de Bohm de la partícula 2 con la 1D aproximación.

tiene la función de onda inicial $\psi_1(x_1, 0)$ definido a partir de la Eq. (2.5) y el potencial $U_1(x_1, x_2[t]) = F(x_1 - x_2[t])$ en la Eq. (2.29). La función de onda $\tilde{\psi}_{1,2}(x_2, t)$ tiene el mismo estado inicial $\psi_1(x_2, 0)$ pero la energía potencial diferente $U_2(x_2, x_1[t]) = F(x_1[t] - x_2)$. Finalmente, $\tilde{\psi}_{\bar{2},1}(x_1, t)$ tiene un estado inicial $\psi_2(x_1, 0)$ y potencial $U_2(x_2, x_1[t]) = F(x_1[t] - x_2)$, mientras $\tilde{\psi}_{\bar{2},2}(x_2, t)$ tiene el mismo estado inicial $\psi_2(x_2, 0)$ y $U_1(x_1, x_2[t]) = F(x_1 - x_2[t])$. La función de onda final $\Psi_1^j(x_1, t)$ y $\Psi_2^j(x_2, t)$ para el cálculo de las trayectorias Bohmianas $x_1^j[t]$ y $x_2^j[t]$, respectivamente son:

$$\begin{aligned} \Psi_1^j(x_1, t) = C & \left(\tilde{\psi}_{1,1}^j(x_1, t) \tilde{\psi}_{2,2}^j(x_2[t], t) \right. \\ & \left. - \tilde{\psi}_{2,1}^j(x_1, t) \tilde{\psi}_{1,2}^j(x_2[t], t) \right), \end{aligned} \quad (2.31)$$

$$\begin{aligned} \Psi_2^j(x_2, t) = C & \left(\tilde{\psi}_{1,1}^j(x_1[t], t) \tilde{\psi}_{2,2}^j(x_2, t) \right. \\ & \left. - \tilde{\psi}_{2,1}^j(x_1[t], t) \tilde{\psi}_{1,2}^j(x_2, t) \right). \end{aligned} \quad (2.32)$$

Hacemos hincapié en que se requiere cuatro funciones de onda (y cuatro partículas) para cada trayectoria $\{x_1^j[t], x_2^j[t]\}$. En la Fig. 2.11, se ha representado la información acerca de las energías de los electrones al igual que hicimos anteriormente para el caso sin interacción de intercambio. La concordancia entre los resultados 2D exactos y los resultados 1D aproximados para partículas idénticas es aceptable. Aparecen dificultades de cálculo cuando $\Psi_a^j(x_a, t)$ está cerca de cero en la diagonal del espacio de configuración. Allí, un pequeño error en el valor del módulo cerca de cero se convierte en un error amplificada en la velocidad en la Eq. (2.9), que es inversamente proporcional al módulo. En cualquier caso, una mejor aproximación de los términos desconocidos $G_a(x_a, x_b[t], t)$ y $J_a(x_a, x_b[t], t)$ en la Eq. (2.23) mejorará la exactitud de los resultados (ya que el algoritmo de exchange no introduce ningún error adicional).

La característica más relevante es que los resultados (ensemble) del conjunto de la primera y segunda partícula no se pueden distinguir con nuestra aproximación 1D de funciones de onda condicionales, aunque se distinguen perfectamente las trayectorias Bohmianas etiquetados como $\{x_1^j[t], x_2^j[t]\}$ (ver círculo, +, x y cuadrado en Fig. 2.11).

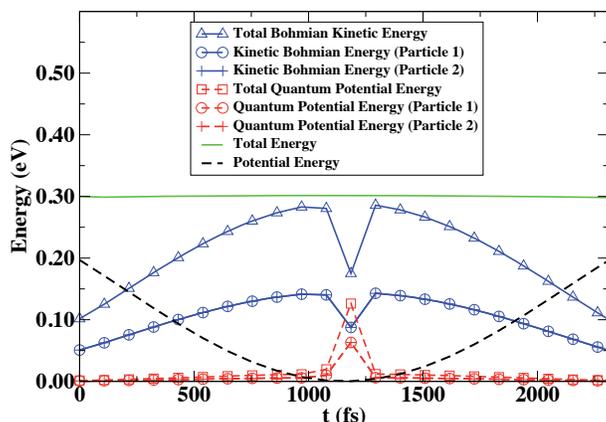


Figura 2.10: (Color en línea) Evolución temporal de las energías totales e individuales (ensemble promedio) de idéntico sistema de fermiones de dos electrones bajo potencial no separable. Total: línea sólida (verde) energía total, línea sólida y triángulo (azul) energía total cinética de Bohm, líneas entre cortadas y cuadrados (rojo) energía total potencial cuántica, línea entre cortada (negro) energía potencial. Partícula individual 1: línea sólida y circle (azul) energía cinética de Bohm, línea entre cortada y círculo (rojo) energía potencial cuántica. Partícula individual 2: línea sólida y + (azul) energía cinética de Bohm, línea entre cortada y + (rojo) energía potencial cuántica.

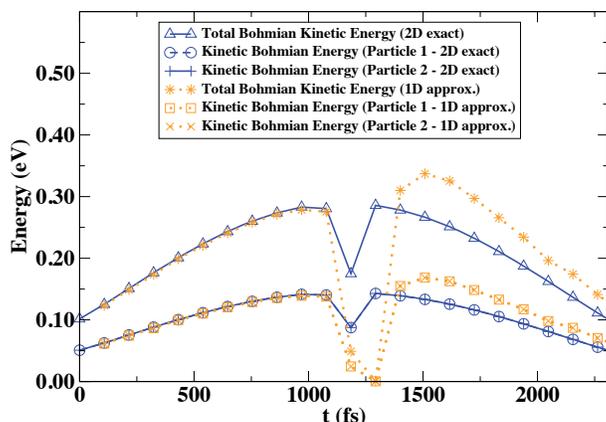


Figura 2.11: (Color en línea) Evolución temporal del individuo (conjunto promedio) energías cinéticas de Bohm de idéntico sistema de fermiones de dos electrones bajo potencial no separable calculado a partir de 2D soluciones exactas y aproximadas 1D. Individual: línea sólida y círculo (azul) energía cinética de Bohm de la partícula 1 con la 2D soluciones exactas, línea sólida y + (azul) energía cinética de Bohm de la partícula 2 con la solución exacta de 2D, línea punteada y x (naranja) energía cinética de Bohm de partículas 1 con la aproximación 1D, línea punteada y cuadrado (naranja) energía cinética de Bohm de la partícula 2 con la aproximación 1D.

Capítulo 3

Densidad de flujo electrónico y modelo dinámico de inyección

3.1. Introducción

En la simulación del transporte electrónico es necesario estudiar sólo una parte del dispositivo, generalmente llamada zona activa. En este capítulo nos ocuparemos de como la interacción de intercambio discutida anteriormente afecta a la inyección de electrones en la zona activa, es decir en nuestra caja simulación. Dedicaremos una especial atención a la inyección en grafeno ya que presenta unas diferencias importantes respecto a otros semiconductores habituales con bandas de energías (relación de dispersión E-k) parabólicas. Empezaremos estudiando la densidad de estados (*density of states* DOS) en la Sec. 3.2. En particular, discutiremos como las técnicas habituales de contar estados no son del todo adecuadas cuando estamos estudiando transporte. En particular, basándonos en el trabajo [94], discutiremos la densidad de estados para paquetes de ondas. Luego, en la Sec. 3.17, introducimos el concepto de densidad de flujo electrónico (*density of flux* DOF). Este nuevo concepto está íntimamente relacionado con el concepto de densidad de estados a través de la velocidad de la partícula. Para cada estado electrónico podemos definir una velocidad; por ejemplo, la velocidad de grupo correspondiente a la relación de dispersión E-k. Entonces, igual que nos planteamos cuál es el numero de estados electrónicos en cada punto del espacio recíproco, nos podemos plantear cuál es el flujo de electrones en cada punto del espacio recíproco. Esta nueva magnitud requiere sólo un cambio de variable: el número de electrones que cruzan ese punto del espacio de configuración por unidad de tiempo. En particular, esta información del flujo de electrones nos será luego muy útil para establecer el modelo de inyección en la Sec. 3.4.

3.2. Densidad de estados electrónicos

¿Cuántas partículas caben en una caja? Esta pregunta simple y familiar puede ser extendida a los sistemas cuánticos. Un aspecto muy importante para entender el transporte

electrónico es saber cuantos electrones hay en cada región del espacio. Un primer paso es saber cuantos estados disponibles hay en una región del espacio para un rango fijado de energías.

3.2.1. Densidad de estados electrónicos en el espacio de fases

A continuación, pasamos a describir los procedimientos habituales que encontramos en la literatura para describir la densidad de estados (DOS) en el espacio de las fases. Definimos el espacio de las fases como aquel espacio matemático cuyos ejes son la posición y velocidad (momento) de las partículas.

Estados electrónicos en una caja de paredes rígidas

Supongamos que nuestro espacio de las fases está limitado para posiciones $0 < x < a$, $0 < y < b$ y $0 < z < c$. Mientras que las velocidades por una energía máxima, que generalmente asociamos con la energía de Fermi. La solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula sin potencial es:

$$\nabla^2 \Psi + k^2 \Psi = 0 \quad , \quad (\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar) \quad (3.1)$$

donde \mathbf{k} es el vector de onda asociado con el momento \mathbf{p} de la partícula. La solución de la ecuación debe satisfacer la condición de frontera de Dirichlet $\Psi = 0$ para toda la frontera según podemos ver en Fig.3.1-izquierda. La solución está dada por:

$$\Psi_{lmn}(r) \propto \sin\left(\frac{l\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{m\pi y}{b}\right) \sin\left(\frac{n\pi z}{c}\right), \quad (3.2)$$

con

$$k = \pi \left(\frac{l^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} + \frac{n^2}{c^2} \right) \quad , \quad l, m, n = 1, 2, 3, \dots$$

También puede resultarnos de interés considerar la condición de borde de Neumann ($\partial\Psi/\partial\hat{n} = \nabla\Psi \cdot \hat{\mathbf{n}}(r) = 0$ ver Fig.3.1-derecha. Entonces, las soluciones posibles en nuestro cubo son:

$$\Psi_{lmn}(r) \propto \cos\left(\frac{l\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{m\pi y}{b}\right) \cos\left(\frac{n\pi z}{c}\right), \quad (3.3)$$

con $l, m, n = 0, 1, 2, 3, \dots$. Destacamos que ahora obtenemos también solución para los número cuánticos $l = 0, m = 0, n = 0$.

Para contar el número total de estados en el espacio de las fases, definimos la función $g(K)$ como:

$$g(K) = \sum_{l,m,n} f(l, m, n),$$

donde $f(l, m, n) = 1$ para $l, m, n = 0, 1, 2, 3, \dots$ con la restricción:

$$\left(\frac{l^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} + \frac{n^2}{c^2} \right) \leq \frac{K^2}{\pi^2}. \quad (3.4)$$

La función $g(K)$ nos cuenta las distintas funciones de onda Ψ_k , con número de onda k que no excede un valor determinado K (vector de onda de Fermi).

Definimos la suma

$$G(K) = \sum_{l,m,n} f^*(l, m, n),$$

donde $f^*(l, m, n) = 1 \forall l, m, n$ (positivo, negativo o cero) bajo la restricción 3.4. De esta forma

$$\begin{aligned} \sum_{l,m,n} f(l, m, n) = & \frac{1}{8} \left[\sum_{l,m,n} f^*(l, m, n) \mp \left\{ \sum_{l,m} f^*(l, m, 0) + \sum_{l,n} f^*(l, 0, n) + \right. \right. \\ & \left. \left. \sum_{m,n} f^*(0, m, n) \right\} + \left\{ \sum_l f^*(l, 0, 0) + \sum_m f^*(0, m, 0) + \right. \right. \\ & \left. \left. \sum_n f^*(0, 0, n) \right\} \mp 1 \right] \end{aligned}$$

donde \mp corresponde, respectivamente, a la condición de borde de Dirichlet y Neumann. La primera suma de la derecha denota el número de puntos de la red, en el elipsoide $\left(\frac{X^2}{a^2} + \frac{Y^2}{b^2} + \frac{Z^2}{c^2}\right) = \frac{K^2}{\pi^2}$, las tres sumas siguientes corresponden a la sección transversal de este elipsoide con el plano-Z, plano-Y y plano-X, y las siguientes tres sumas denotan los puntos sobre los ejes del elipsoide.

Si $a, b, c \gg \pi/K$ podemos reemplazar estos números por el correspondiente volumen, área y longitud, obteniendo:

$$g(K) = \frac{K^3}{6\pi^2}(abc) \mp \frac{K^2}{8\pi}(ab + ca + bc) + \frac{K}{4\pi}(a + b + c) \mp \frac{1}{8} + E(K),$$

donde $E(K)$ es el error neto. Reescribiendo la ecuación anterior (no considerando los términos de orden menor):

$$g(K) = \frac{K^3}{6\pi^2}V \mp \frac{K^2}{16\pi}S + O(K^\alpha), \quad 1 < \alpha < 1,4,$$

y considerando $L = a = b = c$, tenemos que

$$g(K) \approx \frac{K^3}{6\pi^2}L^3 \mp \frac{K^2}{16\pi}6L^2 = \frac{\pi}{6} \left(\frac{K^2 L^2}{\pi^2} \right)^{3/2} \mp \frac{3\pi}{8} \left(\frac{K^2 L^2}{\pi^2} \right).$$

Ahora, definiendo $\varepsilon^* = \frac{K^2 L^2}{\pi^2}$ obtenemos que el número de estados en una caja de lado L es:

$$g(\varepsilon^*) \approx \frac{\pi}{6} \varepsilon^{*3/2} \mp \frac{3\pi}{8} \varepsilon^* \quad (3.5)$$

La derivada respecto la energía de esta función Eq. (3.5) nos dará la densidad energética de estados. Destacamos como las condiciones de contorno del problema en cuestión (Dirichlet y Neumann) afectan muy severamente el número de estados disponibles. A continuación estudiamos otro tipo de condiciones de borde habituales en la literatura.

Estados electrónicos en una caja con condición de borde periódica

La forma más habitual de contar los estados disponibles en la zona activa de un dispositivo electrónico es a través de una **una condición de contorno periódica** (tipo Born-von Karman). La función de onda cumple con

$$\Psi(x, y, z) = \Psi(x + a, y, z) = \Psi(x, y + b, z) = \Psi(x, y, z + c).$$

De esta forma la solución de 3.1 es

$$\Psi_{lmn}(r) \propto e^{ik \cdot r},$$

y la condición anterior se puede describir ahora como

$$e^{ik \cdot r} = e^{i(k_x \cdot x + k_y \cdot y + k_z \cdot z)} = e^{ik_x \cdot (x+a)} e^{ik_y \cdot (y+b)} e^{ik_z \cdot (z+c)} = e^{i(k_x \cdot x + k_y \cdot y + k_z \cdot z)} e^{i(k_x \cdot a + k_y \cdot b + k_z \cdot c)},$$

que es válida cuando

$$e^{i(k_x \cdot a + k_y \cdot b + k_z \cdot c)} = 1.$$

Es decir, tenemos que $k = 2\pi \left(\frac{l}{a}, \frac{m}{b}, \frac{n}{c} \right)$; $l, m, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ El número de estados de una partícula libre está definido por

$$g(K) = \sum_{l,m,n} f^*(l, m, n)$$

tal que

$$\left(\frac{l^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} + \frac{n^2}{c^2} \right) \leq \frac{K^2}{4\pi^2},$$

lo que corresponde al número de puntos dentro del elipsoide

$$\frac{X^2}{\left(\frac{Ka}{2\pi}\right)^2} + \frac{Y^2}{\left(\frac{Kb}{2\pi}\right)^2} + \frac{Z^2}{\left(\frac{Kc}{2\pi}\right)^2} = 1.$$

Ahora, si consideramos que $a, b, c \gg 2\pi/K$ y $L = a = b = c$ tenemos

$$g(K) = \frac{4\pi}{3} \frac{K^3}{8\pi^3} (abc) \approx \frac{K^3}{6\pi^2} L^3.$$

Recordando que $\varepsilon^* = \frac{K^2 L^2}{\pi^2}$, tenemos que el número de estados es

$$g(K) \approx \frac{\pi}{6} \varepsilon^{*3/2}. \quad (3.6)$$

Comparando este resultando con el obtenido en la ecuación 3.5, es claro que al colocar una condición periódica de frontera ya no se tiene en cuenta el término adicional debido al borde.

Enfatizamos de nuevo como el número de estados cambia si consideramos un sistema finito (los sistemas cerrados presentan **estados de borde**) o un sistema periódico. Sin embargo, como estudiaremos a continuación, el uso de funciones de onda periódicas presenta importantes limitaciones al abordar el problema del transporte electrónico.

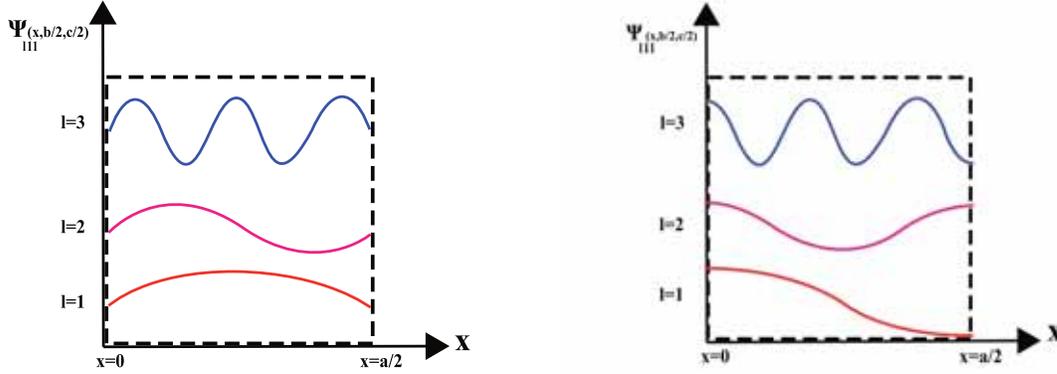


Figura 3.1: (Izquierda) Función de onda sometida a una condición de frontera de Dirichlet. (Derecha) Función de onda sometida a una condición de frontera de von Neumann.

Problemas conceptuales de las condiciones de contorno de Born-von Karman

En el apartado anterior, el número de electrones finito en una región del espacio de las fases tiene su origen en el fenómeno de la cuantización de la energía. Para una aproximación de condiciones periódicas en un espacio 1D en la dirección x , por ejemplo, tenemos una onda unidimensional de la forma $\Psi(x) = e^{ipx/\hbar}/\sqrt{L}$. El momento está cuantizado $p = 2\pi\hbar l/L$, $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, restringiendo a electrones con $\lambda_B = L/l$ (armónicos del periodo L , ver Fig. 3.2 izquierda). De esta manera la cantidad máxima de electrones contenidos en una región de longitud L está definida por el número cuántico l .

Sin embargo en el estudio de transporte ¿Qué sentido tiene estudiar la cuantización de la energía en la dirección x de transporte? El sistema físico correspondiente a un dispositivo electrónico en la dirección de transporte, por definición, no está limitado por barreras infinitas a $x = -L/2$ y $x = L/2$, sino completamente abierto. No podemos solo considerar la contribución de electrones con momentos discretos y determinados, debido a que el momento electrónico en general es una variable continua que depende de la energía del electrón inyectado $p = \sqrt{2m_e E}$. En la figura 3.2 derecha, mostramos la función de onda para electrones con momento próximo a $p = 2\pi\hbar l/L$. Destacamos que estados con la longitud de onda de de Broglie menores que L también contribuyen al transporte electrónico.

Algo importante a señalar es que en las anteriores consideraciones hemos utilizado siempre la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. En los dos primeros ejemplos, el estado era real y por tanto no podría calcularse una corriente. En el caso de las condiciones periódicas (Born-von Karman), la función de onda era una onda plana cuya densidad de probabilidad ($\rho = \Psi^*\Psi$) es homogénea en todo el espacio y constante en el tiempo. La densidad de probabilidad definida como $\rho(x) = |\Psi(x)|^2$ y el flujo de probabilidad como $J(x) = \frac{-i\hbar}{2m}(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x})$ deben cumplir la ecuación de la continuidad ($\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial J(x,t)}{\partial x}$). Para $\Psi(x) = e^{ipx/\hbar}/\sqrt{L}$ (función de onda estacionaria) esto se traduce en $\frac{\partial J(x,t)}{\partial x} = 0 \rightarrow J(x,0) = J_0 = \frac{1}{L} \frac{p}{m} \rightarrow J_0 = \frac{1}{L} v$, donde el flujo de corriente $J = ev/L$ (e

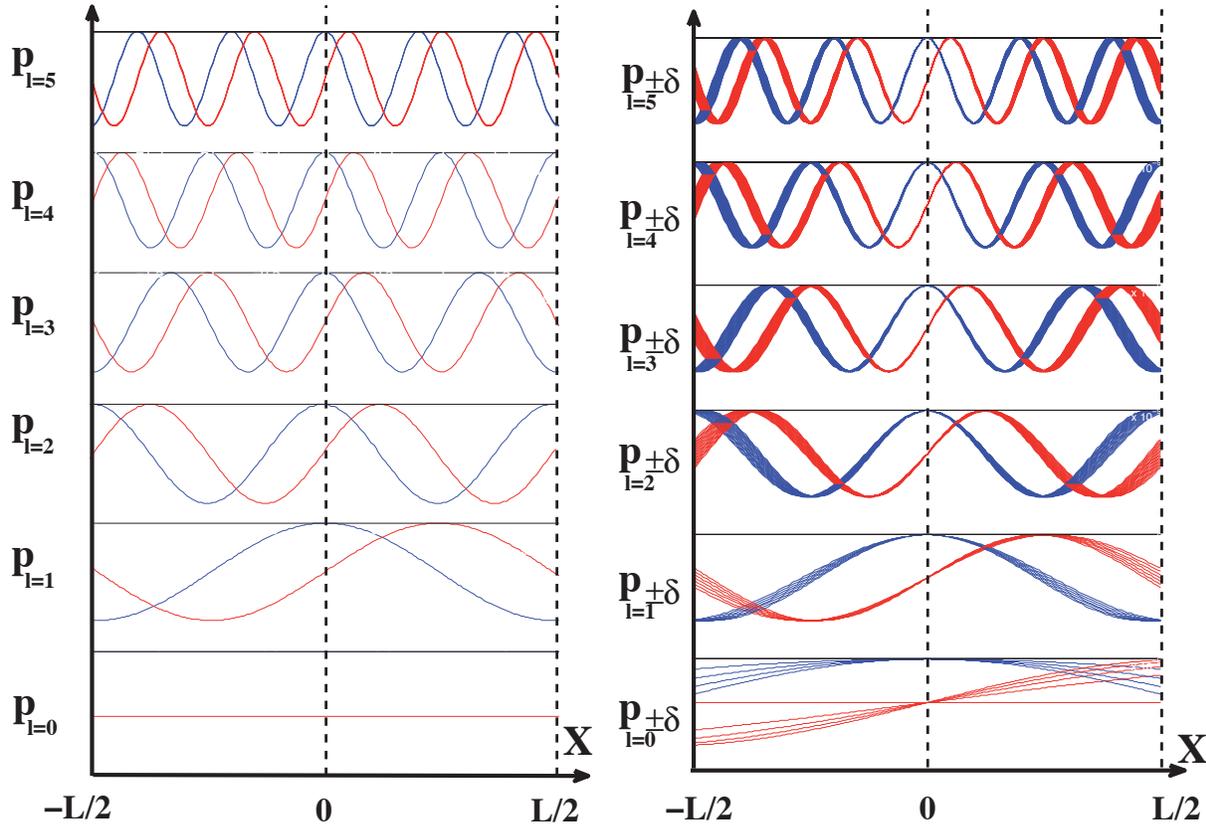


Figura 3.2: Parte real (línea azul) e imaginaria (línea roja) de la función de onda de una partícula libre en 1D, para diferentes valores de momento. Presenta un momento cuantizado $p = 2\pi\hbar l/L$, $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ (izquierda) para una condición de borde tipo Born-von Karman (periodo L) y un momento continuo $p = \pm\sqrt{2m_e E}$ (derecha) para una onda extendida sobre todo el espacio.

carga del electrón) es constante. Transporte es estar en un sitio e ir a otro sitio; no estar en todas partes en todo momento. Una función que tendría un comportamiento más acorde con nuestra intuición sería una superposición de ondas planas que den como resultado un paquete localizado, como los estudiados en el capítulo 2. A continuación deduciremos el concepto de densidad de estados para paquetes a través de imponer la interacción de intercambio.

Explicación alternativa desde la interacción de intercambio entre electrones

Una onda plana (*scattering states*), es un estado muy utilizado en transporte, entendido como el límite de un paquete con una dispersión espacial que tiende a infinito y una dispersión en energía que tiende a cero. Intentemos estudiar la densidad de estados en el espacio de las fases sin tener en cuenta este límite de onda plana, es decir utilizando

paquetes. El paquete de la Eq. (2.5) puede escribirse como:

$$\begin{aligned} \psi_i(x_i, 0) &= \frac{\exp(ik_{oi}x_i)}{(\pi\sigma_{x_i}^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{(x_i - x_{oi})^2}{2\sigma_{x_i}^2}\right) = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk a_i(k) e^{ikx_i} = \int_{-\infty}^{\infty} dk a_i(k) \langle x_i | k \rangle, \end{aligned} \quad (3.7)$$

donde hemos utilizado la definición $e^{ikx_i} = \langle x_i | k \rangle$ y donde se impone la condición de normalización $\int_{-\infty}^{\infty} dk |a_i(k)|^2 = 1$. Utilizando la segunda cuantización, el *ket* de las ondas planas puede escribirse como $|k\rangle = \hat{a}^\dagger(k)|0\rangle$, donde el operador $\hat{a}^\dagger(k)$ crea un electrón descrito por una onda plana con vector de onda k y donde $|0\rangle$ es el estado de vacío (*vacuum state*). Entonces, el estado (ket) de un electrón representado por un paquete de ondas como en la Eq. (3.7) puede escribirse, con ayuda de la superposición, a través del operador

$$\hat{A}_i^\dagger = \int_{-\infty}^{\infty} dk a_i(k) \hat{a}^\dagger(k) \quad (3.8)$$

Estamos interesados en calcular cual es la probabilidad que un electrón, descrito por la Eq. (3.7), con momento central k_{o2} y posición central x_{o2} se *cree* en el espacio cuando sabemos que ya hay otro electrón en ese espacio con momento central k_{o1} y posición central x_{o1} . Esta probabilidad se puede calcular, siguiendo la regla de Born, como la norma del estado $|\Phi\rangle = \hat{A}_2^\dagger \hat{A}_1^\dagger |0\rangle$. En particular, queremos calcular la probabilidad

$$P(\Phi) = \int_{-\infty}^{\infty} dk_1 \int_{-\infty}^{\infty} dk_2 \int_{-\infty}^{\infty} dk_3 \int_{-\infty}^{\infty} dk_4 a_1^*(k_1) a_2^*(k_2) a_2(k_3) a_1(k_4) \langle 0 | \hat{a}(k_1) \hat{a}(k_2) \hat{a}^\dagger(k_3) \hat{a}^\dagger(k_4) | 0 \rangle \quad (3.9)$$

donde hemos definido el operador $\hat{a}(k)$ que destruye un electrón descrito por una onda plana con ese momento. Utilizamos las relaciones de anticonmutación de los operadores $\{\hat{a}(k_i), \hat{a}^\dagger(k_j)\} = \delta_{k_i, k_j}$ para poner los operadores de destrucción directamente delante del estado $|0\rangle$, ya que sabemos que $\hat{a}(k_i)|0\rangle = 0$. Finalmente obtenemos, $\langle 0 | \hat{a}(k_1) \hat{a}(k_2) \hat{a}^\dagger(k_3) \hat{a}^\dagger(k_4) | 0 \rangle = \delta_{k_4, k_1} \delta_{k_3, k_2} - \delta_{k_4, k_2} \delta_{k_3, k_1}$. Por lo tanto, podemos evaluar la Eq. (3.9) como:

$$\begin{aligned} P(\Phi) &= \int_{-\infty}^{\infty} dk_1 |a_1(k_1)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dk_2 |a_2(k_2)|^2 - \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk_1 a_1^*(k_1) a_2(k_1) \int_{-\infty}^{\infty} dk_2 a_2^*(k_2) a_1(k_2) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Nos resultará muy didáctico reencontrar la Eq. (3.10) a través de la primera cuantización, sin utilizar los operadores de creación y destrucción. Calculamos la probabilidad P como la norma del estado antisimétrico $\Phi(x_1, x_2, 0)$ definido por el determinante de Slater de la Eq. (2.6), construido a partir de Eq. (3.7), como:

$$P(\Phi) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \frac{1}{2} |\psi_1(x_1, 0) \psi_2(x_2, 0) - \psi_1(x_2, 0) \psi_2(x_1, 0)|^2. \quad (3.11)$$

Desarrollando el modulo de la función de onda, llegamos fácilmente a la expresión

$$P(\Phi) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x_1, 0)\psi_1(x_1, 0)dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \psi_2^*(x_2, 0)\psi_2(x_2, 0) - \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x_1, 0)\psi_2(x_1, 0)dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \psi_2^*(x_2, 0)\psi_1(x_2, 0) \quad (3.12)$$

Utilizando la expresión $\psi_i(x_i, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} dk a_i(k) e^{ikx_i}$ de la Eq. (3.7) y la función delta de Dirac en k para eliminar integrales espaciales, se puede demostrar fácilmente que la expresión de la Eq. (3.12) es idéntica a la expresión de la Eq. (3.10). Un cálculo, un poco laborioso [94], nos lleva a expresión final:

$$P(\Phi) = 1 - \exp(-d(1, 2)^2), \quad (3.13)$$

donde definimos la distancia en el espacio de las fases normalizada d como las distancias entre las posiciones centrales y los vectores de onda centrales de los dos paquetes de onda:

$$d(1, 2)^2 = \frac{(k_{o1} - k_{o2})^2}{2\sigma_k^2} + \frac{(x_{o1} - x_{o2})^2}{2\sigma_x^2}; \quad i = 2, 3, \quad (3.14)$$

donde $\sigma_k = 1/\sigma_x$ es la dispersión del vector de onda.

En la Fig. 3.3, graficamos, el valor de $1 - P(\Phi)$ en función de varios valores posibles de k_{o2} y x_{o2} . Para grandes valores de d , la probabilidad de encontrar el segundo electrón es $P(\Phi) = 1$ (o $1 - P(\Phi) = 0$). Los electrones se colocan lejos el uno del otro en el espacio de fase y la interacción de intercambio no tiene efecto. Sin embargo, esto no es cierto para pequeños valores de d . Entonces, $P(\Phi)$ decrece a medida que ponemos los electrones más cerca en el interior del espacio de fases. El resultado graficado en Fig. 3.3 es justo la versión de paquete de ondas del célebre principio de exclusión de Pauli: fermiones idénticos no pueden estar en el mismo estado cuántico.

Ahora, resulta extremadamente interesante discutir cuál es el área del espacio de las fases no permitida para el segundo electrón debido a la presencia del primero. Calculamos esta área como:

$$Area = \int_{-\infty}^{\infty} dk_{o2} \int_{-\infty}^{\infty} dx_{o2} (1 - P(\Phi)) = \int_{-\infty}^{\infty} dk_{o2} \int_{-\infty}^{\infty} dx_{o2} \exp(-d(1, 2)^2) = 2\pi \quad (3.15)$$

Este resultado $Area = 2\pi$ es un valor universal independiente de los parámetros de los paquetes gaussianos. Demuestra que cada electrón crea alrededor suyo un *exchange hole* cuya área en el espacio de las fases es 2π . Como se muestra en la figura Fig. 3.3, esta área puede definirse a través de los puntos del espacio de las fases que cumplen la relación $d(1, 2) = 1$ en Eq. (3.14).

Como se explica en [94] y en la figura Fig. 3.4, llegaríamos al mismo resultado si consideráramos $N - 1$ electrones e intentáramos introducir uno más para llegar a tener N . Durante todo este apartado nos hemos centrado, por simplicidad, en electrones sin spin en la solución de la ecuación de Schrodinger. Sin embargo, se puede demostrar que exactamente los mismos resultados pueden encontrarse para electrones en grafeno que son solución de

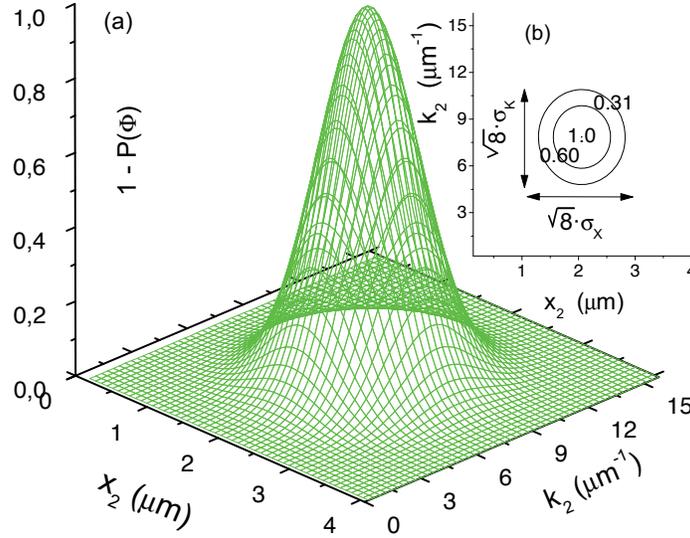


Figura 3.3: (a) Probabilidad de no encontrar un segundo paquete con posiciones centrales $x_{o2} = x_2$ y vector de onda central $x_{o2} = x_2$ debido a la presencia de un electrón previo en $x_{o1} = 2 \mu m$ y $k_{o1} = 8 \mu m^{-1}$. (b) Contorno de la figura a. La línea de 0.31 corresponde a una elipse con un área de 2π .

la ecuación de Dirac (cf. el apéndice B). La consideración del spin hubiera proporcionado una doble degeneración del espacio de las fases. Dos electrones con la misma parte orbital e idéntico spin darían el mismo resultado [95]. Mientras que los mismos electrones con idéntica parte orbital, pero diferentes spins serían ortogonales y obtendríamos $P(\Phi) = 1$.

En conclusión, a través de las condiciones de Born-von Karman habíamos llegado a que el vector de onda solo podía tener los valores cuantizados $k = 2\pi l/L$, $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. De esta manera la cantidad máxima de electrones N_{max} contenidos en una región del espacio de las fases longitud L y vector de onda máximo K está definida por el número $N_{max} = K/(2\pi/L)$, siendo $2\pi/L$ el intervalo entre vectores de onda contiguos. Este número puede interpretarse como $N_{max} = K L/(2\pi)$. Es decir, como el espacio de las fases considerado dividido por 2π . Cada electrón ocupa 2π en el espacio de las fases. Este ha sido precisamente el resultado que hemos obtenido en este apartado independientemente de la cuantización de la energía. Recordamos que en este último apartado no hemos impuesto absolutamente ninguna condición de contorno a nuestros paquetes de ondas.

3.3. Densidad de flujo electrónico

En esta sección presentamos un nuevo concepto que llamamos densidad de flujo (*density of flux* DOF). La densidad de estados nos dice cuántos estados (electrones) hay en cada porción del espacio de las fases. Por el contrario, la densidad de flujo nos indica cuántos electrones fluyen (por unidad de tiempo) en cada porción del espacio de las fases. Los dos

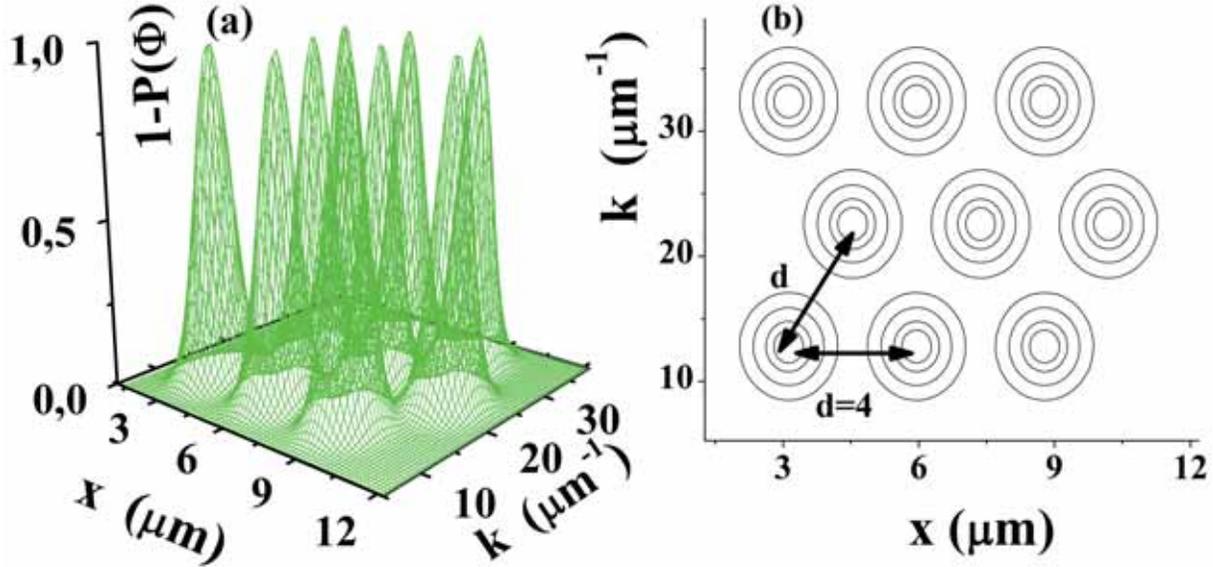


Figura 3.4: (a) La presencia de $N=9$ electrones en una región del espacio de las fases implica que la probabilidad $P(\Phi)$ de encontrar $N=10$ electrones en esta región es prácticamente cero. (b) Dibujo del contorno de la figura (a) donde cada electrón está separado una distancia normalizada d del resto. Cada electrón requiere un espacio de las fases de 2π para sí mismo.

conceptos están íntimamente relacionados, y sólo se requiere saber cual es la velocidad de cada punto de espacio de las fases (por ejemplo, a través de la velocidad de grupo de la dispersión $E-k$) para pasar de uno a otro. El concepto de DOF nos permitirá en la próxima sección desarrollar un modelo de inyección de electrones. La densidad de flujo se basa en la velocidad de grupo de la estructura de bandas. Por lo tanto, diferentes estructuras de bandas dan lugar a diferentes DOFs.

Para un sistema 2D, hemos visto que el número máximo de electrones cuyas posiciones $\{x, z\}$ y vectores de onda $\{k_x, k_z\}$ están dentro del espacio de las fases (2D) $\Delta x \Delta K_x \Delta z \Delta K_z$, es $N_{max} = g_s g_v \Delta x \Delta K_x \Delta z \Delta K_z / (2\pi)^2$, con g_s la degeneración de spin y g_v la degeneración de valles. Tal y como hemos discutido, un electrón (o el estado que lo representa) necesita un espacio 2π para cada dimensión. Podemos pasar ahora fácilmente al concepto de DOF. Los electrones en la región del espacio de las fases $\Delta x \Delta z \Delta K_x \Delta K_z$ se mueven en la dirección de transporte x con la velocidad v_x (suponemos una región suficientemente pequeña para que no haya variaciones de velocidad). Todos los electrones se mueven hasta otra región del espacio de fases durante el tiempo $T = \Delta x / v_x$. Por lo tanto, si durante el tiempo T tenemos N_{max} electrones que atraviesan la región del espacio Δx , entonces podemos decir que el tiempo que cada electrón necesita para salir de la región del espacio de configuración será:

$$t_o = T / N_{max} = (2\pi)^2 / (g_s g_v \Delta z \Delta K_x \Delta K_z v_x). \quad (3.16)$$

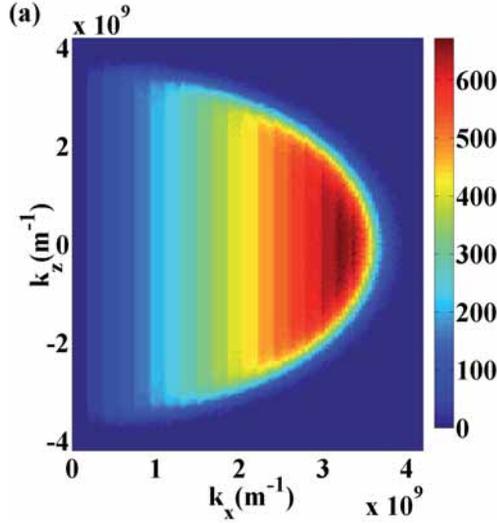


Figura 3.5: Densidad de flujo (DOF) calculado a partir de la Eq. (3.17) para cada punto de un espacio de configuración $\{k_x, k_z\}$. Se presenta en número total de electrones inyectados durante 1 ps a 100 K, cuando la energía de Fermi era $E_f = 0,1$ eV. Para el silicio representado en esta figura, el valor máximo de la DOF aparece para las energías más altas que tienen mayor velocidad. En este caso v_x es separable y solo depende de $\{k_x\}$.

La densidad de flujo (DOF) para un sistema 2D puede definirse como la inversa de este tiempo:

$$DOF(\Delta z, \Delta K_x, \Delta K_z) = \frac{g_s g_v \Delta z \Delta K_x \Delta K_z v_x}{4\pi^2} \quad (3.17)$$

con unidades de números de electrones por segundo. Vemos que el flujo en la dirección x no depende de Δx . Una explicación similar para t_o y la DOF para otros sistemas 1D, 2D y 3D con bandas parabólicas puede encontrarse en la referencia [96]. Aquí, estamos interesados en remarcar que diferencias encontraremos si la estructura de bandas es lineal como en el grafeno. Recordemos que para grafeno la velocidad puede ser

$$v_x = v_g k_x / \sqrt{k_x^2 + k_z^2} \quad (\text{dispersión lineal}) \quad (3.18)$$

con aproximadamente $v_g = 3e6$ m/s para la velocidad de Fermi del grafeno. Si el material es Silicio (o cualquier otro material con bandas parabólicas), tendremos

$$v_x = \hbar k_x / m \quad (\text{dispersión parabólica}) \quad (3.19)$$

con $m = 0,9m_o$ para la masa efectiva del silicio (que es la que utilizaremos en los resultados numéricos de este capítulo).

En la Fig. 3.5 hemos representado la DOF para el Silicio 2D con una banda parabólica. En la figura Fig. 3.6, la misma información para el grafeno con dispersión lineal. Antes de inyectar los electrones según la Eq. (3.16), calculamos la energía de los electrones.

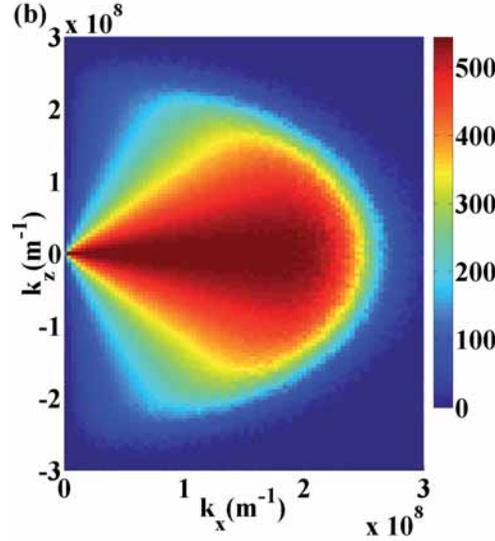


Figura 3.6: Densidad de flujo (DOF) calculada a partir de la Eq. (3.17) para cada punto de un espacio de configuración $\{k_x, k_z\}$. Se presenta en numero total de electrones inyectados durante 1 ps a 100 K, cuando la energía de Fermi era $E_f = 0,1$ eV. Para el grafeno el máximo de la DOF aparece en casi todos los puntos $\{k_x, k_z\}$, excepto en aquellos con k_z elevado [5]. La velocidad v_x depende explícitamente de $\{k_x, k_z\}$.

Finalmente la inyección sólo se produce si se cumple la distribución probabilística de Fermi. Queremos destacar que la velocidad v_x depende explícitamente de $\{k_x, k_z\}$ en grafeno; no así en silicio. Este hecho dificulta la elaboración de un algoritmo para la inyección correcta de electrones en el grafeno, como se verá en la siguiente sección.

3.4. Modelo de inyección de electrones

La investigación del transporte cuántico de electrones en sistemas de baja dimensión (dispositivos nanométricos, moléculas, nanotubos, etc.) requiere la obtención de adecuados contactos electrónicos para la inyección de carga. En forma similar, la correcta simulación de contactos electrónicos es crucial para la obtención de buenos resultados en el estudio de nanoestructuras. Actualmente se viene desarrollando un intenso trabajo en el desarrollo de nanodispositivos en grafeno, sin embargo poco se discute sobre la forma en que se debe inyectar los electrones para no perturbar las interesantes propiedades que el grafeno presenta. El motivo reside en que el transporte en grafeno es en gran medida cuántico, y éste se focaliza en el comportamiento DC estacionario. Entonces, los estados utilizados para modelar la función de onda del electrón son estacionarios (*scattering states*) y conocer la DOF no tiene gran interés.

En esta sección abordamos el problema de modelar el contacto ohmico para una heteroestructura de grafeno. Esta inyección de electrones es útil para la simulación semiclásica de Monte Carlo y también para el transporte cuántico dependiente del tiempo.

Primeramente queremos mencionar que, cuando nos referimos a contacto, no se requiere que sea un contacto físico del dispositivo, sino que es el límite de la caja de simulación. En este sentido, el modelo está inspirado en la Fig. 3.7, donde la caja de simulación tiene una longitud L_x de grafeno y el reservorio es también de grafeno. La diferencia entre ambas regiones es que la primera la simulamos explícitamente, mientras que la segunda no. Tal y como discutimos en la Fig. 3.4, suponemos que los electrones están distribuidos de forma ordenada en el espacio de las fases en forma de paquetes de ondas, pero respetando el principio de exclusión de Pauli.

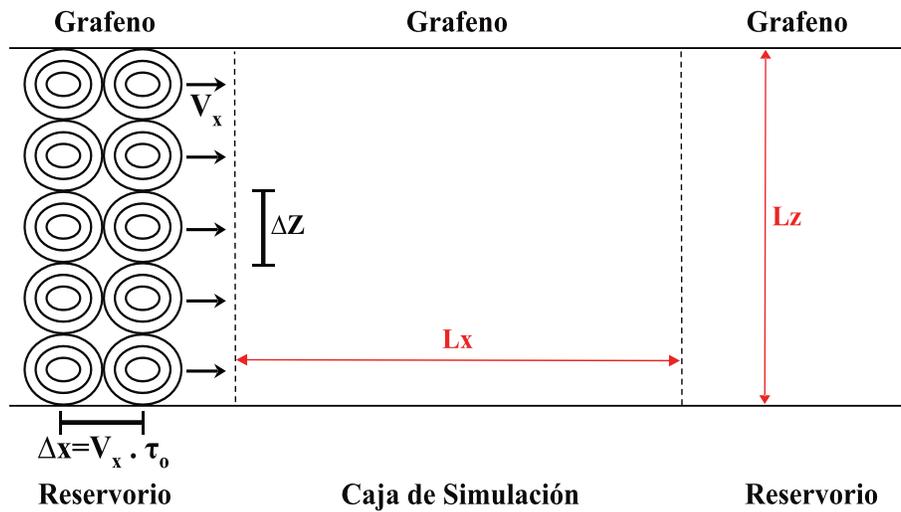


Figura 3.7: Presentación esquemática del modelo de inyección.

El algoritmo de inyección está esquemáticamente explicado en la Fig. 3.8. El primer paso es elaborar un grid 2D del espacio recíproco. Como se ha dicho, al tener la velocidad v_x dependencia en k_x y k_y , se requiere este mallado 2D que además debe de ser lo suficientemente fino para que la velocidad v_x sea constante para todos los electrones. El segundo paso es el cálculo del número de intentos que se van a necesitar para inyectar en cada celda del grid. Si el step temporal de la simulación fuera infinitamente pequeño, este número sería 0 o 1, pero en un caso finito el número de electrones que deben ser inyectados puede ser incluso mayor que 1. El tercer paso es calcular la energía y seguir la estadística de Fermi para evaluar si la inyección se realiza efectivamente o no. Este modelo está implementado en el simulador BITLLES [97].

3.4.1. Distribución de corriente de electrones

De acuerdo con el modelo de inyección anterior, se ha desarrollado una simulación simple de Monte Carlo para grafeno y Silicio. Las diferencias se muestran en las Fig. 3.9 y Fig. 3.10. La corriente instantánea dibujada en estas gráficas se define a través de la velocidad como $I = q \cdot v_x / L_x$, y por tanto la misma gráfica se puede entender como un histograma de velocidades para Grafeno y para Silicio.

```

% Main definitions
INDEX=1,...,N_INJ_LIMIT % INDEX takes all points of the 2D graphene phase space
DT % Simulation step
At each DT of the simulation
  % Bucle on all points of the 2D phase space
  DO INDEX=1,N_INJ_LIMIT % Bucle on all points of the 2D phase space
    TEMPS_MITJA=TAULA_TEMPS_MITJA(INDEX)%2*PI/2/(INCREMENTK_RES)/VELOCX

    IF(TEMPS_MITJA > DT) THEN
      ↑
      INTEMPS=INT(TEMPS_MITJA/DT)+1
      INTEMPS0=TAULA_INTENTS(INDEX) % Offset to avoid initial ordering
      IF(MODULO(NITSCHO,INTEMPS-INTEMPS0).EQ.0) THEN
        INTENTS=1
      ELSE
        INTENTS=0
      ENDIF
    ELSE % TEMPS_MITJA < DTSCHO
      ↓
      INTENTS=TAULA_INTENTS(INDEX)
    ENDIF

    DO I=1,INTENTS %Number of atemps
      ↑
      ENERGY=TAULA_ENERGIA(INDEX) %Computing the energy of index
      AUX1=FERMI(ENERGY) % Computing the fermi-dirac occupation function
      R=RANDOM % random number between 1 and 0
      IF (R.LE.AUX1) THEN
        % Effective injection
        KX=TAULA_KX(INDEX)
        KZ=TAULA_KZ(INDEX)
        VELOCX=TAULA_VELOCX(INDEX)
        VELOCITY=TAULA_VELOCITY(INDEX)
      ENDIF
      ↓
    ENDDO %BUCLE INTENTS
  ENDDO %index
Repeat at each DT of the simulation

```

Figura 3.8: Presentación esquemática del algoritmo de inyección.

Es importante notar que si medimos el valor medio de la corriente (DC), estas diferencias no serán relevantes. Sin embargo sí que tendrán su importancia para alta frecuencia y para el calculo de la densidad espectral de ruido para Silicio y grafeno. Ver la Fig. 3.11

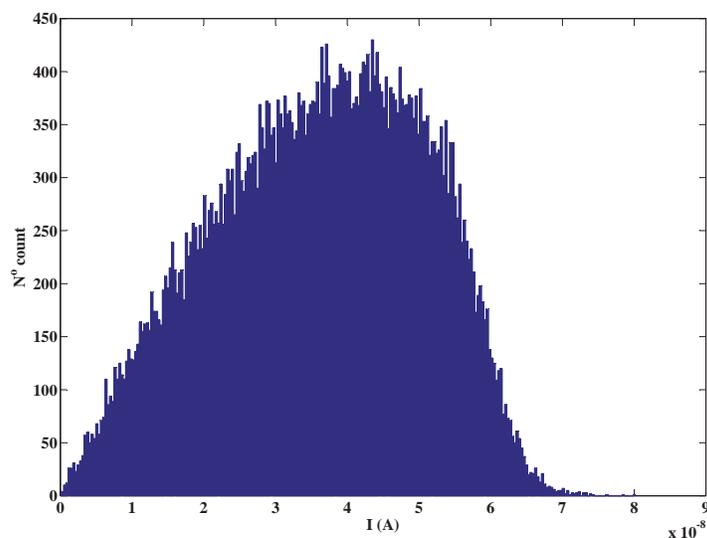


Figura 3.9: Número de electrones en función del valor de la corriente instantánea I durante la simulación de un 1 ps a 100 K, con una energía de Fermi de $E_f = 0,1$ eV para Silicio. Hay una gran variedad de velocidades (corrientes).

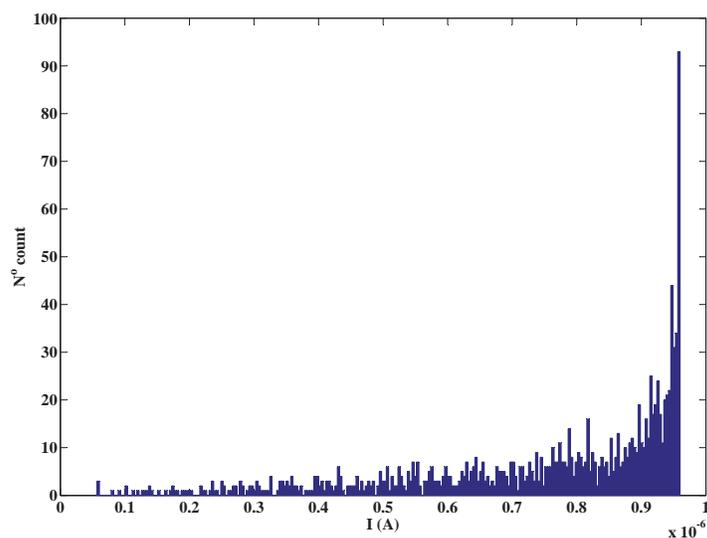


Figura 3.10: Número de electrones en función del valor de la corriente instantánea I durante la simulación de un 1 ps a 100 K, con una energía de Fermi de $E_f = 0,1$ eV para Grafeno. Prácticamente todos los electrones se mueven con la misma velocidad (generan la misma corriente).

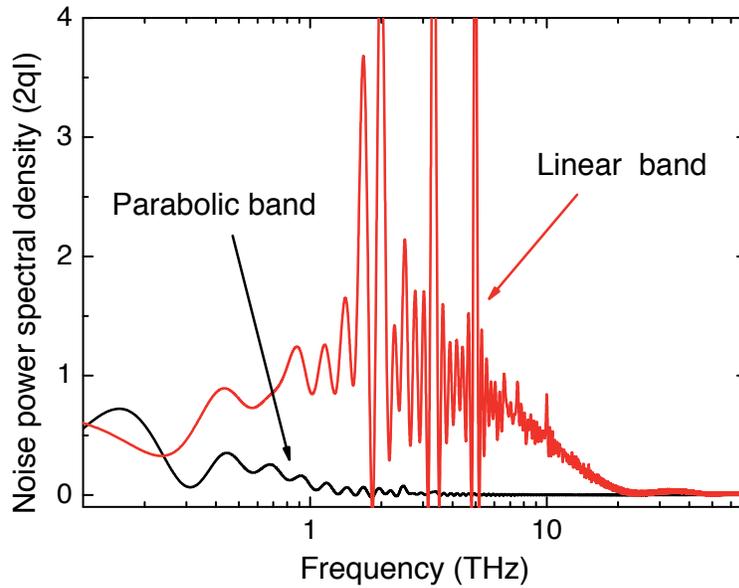


Figura 3.11: Densidad espectral de potencia de las fluctuaciones de la corriente, $S(f)$, en función de la frecuencia f para el grafeno ideal balístico resistencias de dos terminales con $l_x=100\text{nm}$ y $L_z = 1\mu\text{m}$ con un nivel de Fermi $E_f = 0,05\text{eV}$. Los resultados muestran que el grafeno (rojo) tiene una mayor frecuencia de corte de $S(f)$ que el silicio (negro) a causa de que los pulsos de corriente generados por cada electrón son mas cortos. La presencia de una oscilación del grafeno (rojo) en $f_o \approx 1,5\text{ THz}$ está relacionada con el tiempo de $t_o = 1/f_o$ de la Ec. (3.16) que se ha utilizado.

Capítulo 4

Estados electrónicos cuasi-unidimensionales en ondulaciones de grafeno

En el presente capítulo estudiamos el efecto de la deformación en las propiedades electrónicas del grafeno y la formación de estados cuasi-unidimensionales en ondulaciones. Este fenómeno tiene particular interés por las dificultades que presenta confinar el electrón con barreras de potencial convencional. En la siguiente sección hacemos una pequeña exposición sobre el transporte electrónico en grafeno.

4.1. Aproximación de la masa-efectiva: Fermiones de Dirac sin masa

A partir de la ecuación (1.27) se puede obtener el Hamiltoniano de Dirac: partiendo de

$$\mu = t \left[e^{\frac{ik_y a}{\sqrt{3}}} + 2e^{\frac{-ik_y a}{2\sqrt{3}}} \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \right], \quad (4.1)$$

y expresándolo como función de $\mathbf{k}' \equiv \mathbf{k} - \mathbf{K}$, donde $\mathbf{K} = (4\pi/3a, 0)$, obtenemos que

$$\mu = t \left[e^{\frac{ik'_y a}{\sqrt{3}}} + e^{\frac{2\pi i}{3}} e^{i\left(\frac{-k'_y a}{2\sqrt{3}} + \frac{k'_x a}{2}\right)} + e^{\frac{-2\pi i}{3}} e^{i\left(\frac{-k'_y a}{2\sqrt{3}} - \frac{k'_x a}{2}\right)} \right].$$

Realizando una expansión en serie de Taylor entorno a \mathbf{k}' y considerando solamente el primer y segundo orden de aproximación de la exponencial, tenemos:

$$\mu = -t \frac{\sqrt{3}a}{2} (k'_x - ik'_y) \quad (4.2)$$

y

$$\mu^* = -t \frac{\sqrt{3}a}{2} (k'_x + ik'_y). \quad (4.3)$$

60 4. Estados electrónicos cuasi-unidimensionales en ondulaciones de grafeno

con lo que el Hamiltoniano efectivo para \mathbf{k} cerca de \mathbf{K} es:

$$\frac{\sqrt{3}a}{2}t \begin{pmatrix} 0 & k_x' - ik_y' \\ k_x' + ik_y' & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_A^K \\ C_B^K \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} C_A^K \\ C_B^K \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

De forma semejante procedemos para el punto $\mathbf{K}' = (-4\pi/3a, 0)$, obteniendo:

$$\frac{\sqrt{3}a}{2}t \begin{pmatrix} 0 & -k_x' - ik_y' \\ -k_x' + ik_y' & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_B^{K'} \\ C_A^{K'} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} C_B^{K'} \\ C_A^{K'} \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

donde el orden de los componentes del espinor es seleccionado de acuerdo con [98] y [99]. Procedemos a escribir el Hamiltoniano en forma más compacta:

$$\frac{\sqrt{3}a}{2}t \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y & 0 & 0 \\ k_x + ik_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -k_x - ik_y \\ 0 & 0 & -k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_A^K \\ C_B^K \\ C_B^{K'} \\ C_A^{K'} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} C_A^K \\ C_B^K \\ C_B^{K'} \\ C_A^{K'} \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

que es análogo a la ecuación de Dirac para $m = 0$:

$$v_F \begin{pmatrix} \sigma \cdot \mathbf{p} & 0 \\ 0 & \sigma' \cdot \mathbf{p} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi^K \\ \psi^{K'} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi^K \\ \psi^{K'} \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

donde la velocidad de Fermi es dada por: $v_F = \sqrt{3}at/2\hbar \approx 10^6 m/s$, el *momentum*: $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ y la matriz de Pauli $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y)$, $\sigma' = (-\sigma_x, \sigma_y)$. Escribimos la ecuación (4.6) en su forma polar:

$$\mathcal{H} = v_F |\mathbf{k}| \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\Theta(k_x, k_y)} & 0 & 0 \\ e^{+i\Theta(k_x, k_y)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -e^{+i\Theta(k_x, k_y)} \\ 0 & 0 & -e^{-i\Theta(k_x, k_y)} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

Las autofunciones para $E = +\hbar v_F |\mathbf{k}|$ y $E = -\hbar v_F |\mathbf{k}|$ en K son dadas por

$$\psi_{c, \mathbf{k}}^K(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{2S}} \begin{pmatrix} e^{-i\Theta(\mathbf{k})/2} \\ e^{+i\Theta(\mathbf{k})/2} \end{pmatrix}, \quad \psi_{v, \mathbf{k}}^K(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{2S}} \begin{pmatrix} e^{-i\Theta(\mathbf{k})/2} \\ -e^{+i\Theta(\mathbf{k})/2} \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

donde $\Theta(k_x, k_y) = \arctan(k_y/k_x)$, “ c ” corresponde a la banda de conducción, “ v ” la banda de valencia. Las autofunciones en K' para $E = +\hbar v_F |\mathbf{k}^*|$ y $E = -\hbar v_F |\mathbf{k}^*|$ son dadas por

$$\psi_{c, \mathbf{k}^*}^{K'}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}^* \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{2S}} \begin{pmatrix} e^{+i\Theta(\mathbf{k}^*)/2} \\ -e^{-i\Theta(\mathbf{k}^*)/2} \end{pmatrix}, \quad \psi_{v, \mathbf{k}^*}^{K'}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}^* \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{2S}} \begin{pmatrix} e^{+i\Theta(\mathbf{k}^*)/2} \\ e^{-i\Theta(\mathbf{k}^*)/2} \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

donde \mathbf{k}^* es el conjugado complejo y para simplificar los cálculos consideramos $S = 1$.

De las autofunciones podemos identificar la simetría entre la banda de conducción y la banda de valencia:

$$\begin{pmatrix} \psi_{v, \mathbf{k}}^K(\mathbf{r}) \\ \psi_{v, \mathbf{k}^*}^{K'}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = I \otimes \sigma_z \begin{pmatrix} \psi_{c, \mathbf{k}}^K(\mathbf{r}) \\ \psi_{c, \mathbf{k}^*}^{K'}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}.$$

También tenemos la simetría de translación:

$$\mathbf{T}_{A \rightarrow A} = \begin{pmatrix} e^{i\frac{4\pi}{3}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{4\pi}{3}} \end{pmatrix} \otimes I$$

simetría de rotación:

$$\mathbf{C}_{\pi/3} = \sigma_x \otimes \begin{pmatrix} e^{i\frac{2\pi}{3}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{2\pi}{3}} \end{pmatrix},$$

simetría de reflexión:

$$\mathbf{S}_x = I \otimes \sigma_x$$

y la simetría de inversión temporal:

$$\mathbf{T} = (\sigma_x \otimes I)\kappa$$

donde κ es el operador complejo conjugado. En las operaciones anteriores, el primer espacio del producto tensorial corresponde a los dos puntos K, K' degenerados en el nivel de Fermi, mientras que el segundo corresponde los dos caracteres, valencia y conducción.

4.1.1. Efecto del Campo Magnético Externo

Aplicando un campo magnético B perpendicular al grafeno con un potencial vectorial $\mathbf{A}(y) = (-By, 0)$ y considerando el análisis entorno al punto K tenemos, sustituyendo el operador *momentum* $\hat{\mathbf{p}}$ por $\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}$ (acoplamiento mínimo o sustitución de Peierls), la ecuación:

$$\pm v_F [\sigma_x(\hat{p}_x - eBy) + \sigma_y\hat{p}_y] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (4.11)$$

tomando la solución + (banda de conducción)

$$\psi_{c,\mathbf{k}}^K(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_1^K(\mathbf{r}) \\ \psi_2^K(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$$

obtenemos:

$$v_F [p_x - eBy - ip_y] \psi_2^K(\mathbf{r}) = E\psi_1^K(\mathbf{r}) \quad (4.12)$$

$$v_F [p_x - eBy + ip_y] \psi_1^K(\mathbf{r}) = E\psi_2^K(\mathbf{r}). \quad (4.13)$$

Sustituyendo la primera ecuación en la segunda obtenemos

$$v_F [p^2 - 2eBy p_x + e^2 B^2 y^2 - \hbar e B] \psi_2^K(\mathbf{r}) = E^2 \psi_2^K(\mathbf{r}), \quad (4.14)$$

con las autoenergías dadas por:

$$E_n^2 = 2n\hbar e B v_F^2 \quad (4.15)$$

donde $n = 1, 2, 3, \dots$ y la constante $-\hbar e B$ desplaza los niveles, garantizando la formación de un nivel energético en $E = 0$. Reescribiendo la energía:

$$E_n = \text{sgn}(n) \sqrt{2n\hbar e B v_F^2}, \quad (\text{Niveles de Landau}) \quad (4.16)$$

62 4. Estados electrónicos cuasi-unidimensionales en ondulaciones de grafeno

para $n > 0$ corresponde a electrones y $n < 0$ a huecos. Y tenemos un nivel de energía en $E = 0$, correspondiente a $n = 0$ como resultado de la simetría quiral y la simetría electrón-hueco.

La dependencia de los niveles de Landau con la raíz cuadrada de n ($E_n \approx \sqrt{n}$), puede ser mejor comprendida si consideramos la densidad de estado para el grafeno. Debido a la linealidad de la relación de dispersión, la DOS es dada por:

$$\rho(E) = \frac{E}{2\pi\hbar^2 v_F}$$

y en presencia de campo magnético la DOS colapsa en niveles, cada uno de los cuales tiene el mismo número de estados: $2eB/\hbar$.

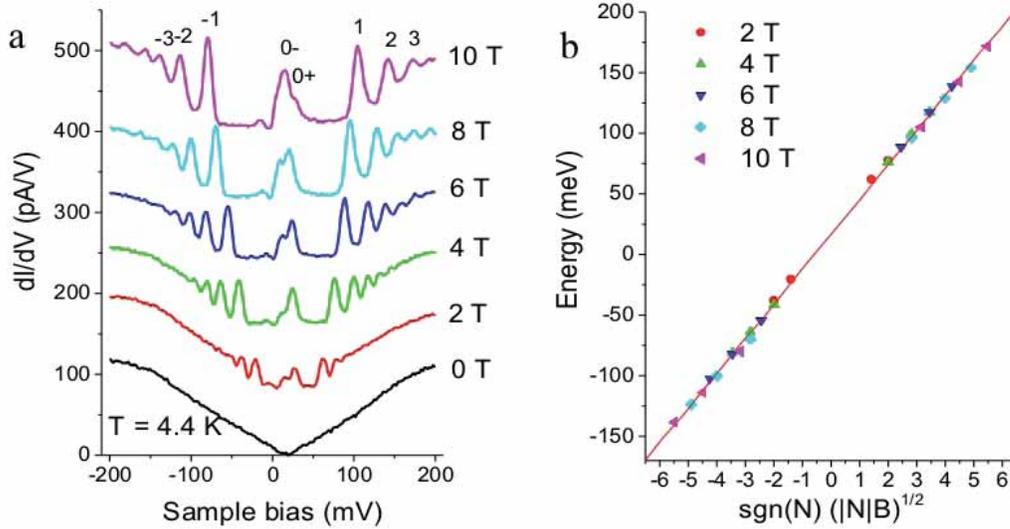


Figura 4.1: Espectroscopía en grafeno. a) Evolución de los niveles de Landau con el campo magnético para 4.4 K. b) Niveles de energías en función del parámetros reducido $(|N|B)^{1/2}$. [6].

4.1.2. Deformaciones locales en grafeno y pseudocampo magnético

La dinámica de los portadores en el grafeno real difiere del caso del grafeno ideal, entre otras cosas, por la presencia de fluctuaciones en la forma (burbujas, ondulaciones, fonones, etc.) que resultan en la modificación de los elementos de matriz de solapamiento a primeros vecinos entre orbitales π (Eq. 1.28), y las energías potenciales *on site*. Nos referimos al cambio de la integral de solapamiento entre primeros vecinos como interacción *off site*, y al desplazamiento de la energía potencial *on site* como interacción *on site*.

Bajo la presencia de perturbaciones en la estructura con una longitud característica grande (i.e. vector de onda pequeño), sólo habrá *scattering* dentro de un mismo valle (*intravalley scattering*), en el que los estados inicial y final permanecerán en la vecindad de K (K'). En estas condiciones, se puede demostrar [68] que una variación local del parámetro de *hopping* $-\gamma_0 \rightarrow -\gamma_0 + \delta\gamma_0^a(\mathbf{r}_i)$, donde $a = 1, 2, 3$ identifica los primeros vecinos, termina dando lugar a un Hamiltoniano efectivo

$$\mathcal{H}_0^K + \mathcal{H}_1^K = v_F \sigma \cdot (\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{A}^q(\mathbf{r})) \quad (4.17)$$

$$\mathcal{H}_0^{K'} + \mathcal{H}_1^{K'} = v_F \sigma' \cdot (\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{A}^q(\mathbf{r})), \quad (4.18)$$

con

$$\begin{aligned} v_F A_x^q(\mathbf{r}) &= \delta\gamma_0^1(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} (\delta\gamma_0^2(\mathbf{r}) + \delta\gamma_0^3(\mathbf{r})), \\ v_F A_y^q(\mathbf{r}) &= \frac{\sqrt{3}}{2} (\delta\gamma_0^2(\mathbf{r}) - \delta\gamma_0^3(\mathbf{r})). \end{aligned} \quad (4.19)$$

Viendo que las Ecs. 4.17 y 4.18 tienen una forma funcional idéntica a la discutida en la Sec. 4.1.1, la magnitud $\mathbf{A}^q(\mathbf{r})$ recibe el nombre de potencial vector pseudomagnético, ya que se acopla al pseudospin en la ecuación de Dirac. La cantidad que resulta de aplicar el rotacional es, por tanto, el campo pseudomagnético.

Las perturbaciones en la red de vector de onda grande sí son capaces de provocar *intravalley scattering* (e.g. de K a K' y viceversa). En este caso la descripción mediante el potencial vector pseudomagnético debe ser extendida con un término escalar

$$\phi^q(\mathbf{r}) \equiv (A_x^q(\mathbf{r}) + iA_y^q(\mathbf{r}))e^{-i2\mathbf{k}_F \cdot \mathbf{r}}. \quad (4.20)$$

que posibilita las transiciones mencionadas entre valles.

Las variaciones locales de las energías *on site* también dan lugar a términos adicionales en el Hamiltoniano efectivo, aunque no entraremos en detalle ya que su inclusión no es relevante para nuestro análisis.

Finalmente, mencionar que las metodologías *ab initio* van más allá de la descripción por campos pseudomagnéticos, ya que incluyen interacciones a vecinos a todas las distancias, efectos en las expansiones de orden superior al lineal, etc.

4.2. Ondulaciones en grafeno

Es común encontrar la presencia de ondulaciones y arrugas en el grafeno, tanto en las muestras obtenidas por exfoliación mecánica como las obtenidas por deposición química por otras técnicas como el CVD (del inglés *Chemical Vapor Deposition*) [8]. Éstas presentan gran interés debido a que modulan nuevos fenómenos como la presencia de pseudo campos magnéticos, polarización de subred, formación de “midgaps” en la estructura de bandas, etc. Sin embargo, las nuevas nanoestructuras periódicas, al formar una superred, posibilitan la formación de mini-bandas pudiendo generar *pseudogaps* que pueden ser útiles para controlar corrientes electrónicas. Una ventaja adicional de estas estructuras unidimensionales es que permiten definir más fácilmente la orientación cristalográfica del sistema.

64 4. Estados electrónicos cuasi-unidimensionales en ondulaciones de grafeno

La tendencia del grafeno a formar ondulaciones produce una variación espacial del potencial electroquímico, que teóricamente es proporcional al cuadrado de la curvatura local. Esto es debido a los efectos de re-hibridización y los cambios en los elementos de *hopping* causados por la deformación [100]. Estas ondulaciones no empobrecen las propiedades electrónicas del grafeno. Aunque la presencia aleatoria de nanoarrugas puede inducir una fluctuación desordenada de la densidad de carga, lo que puede afectar la propagación de los portadores ¹, la formación de ondulaciones periódicas nanométricas genera una física mucho mas rica, dando origen a superredes que modifican su relación de dispersión y pueden hacer que la velocidad de propagación de los portadores de carga sea altamente anisotrópica [7].

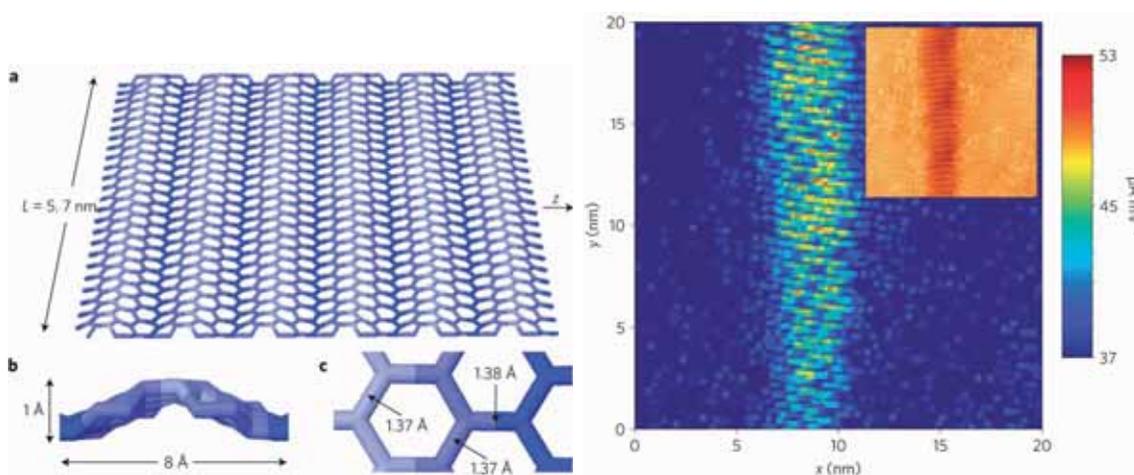


Figura 4.2: Figura izquierda: Simulación de nanoondulaciones en grafeno. Figura derecha: Medidas de LDOS y en la imagen interior se muestra la topografía por microscopía de efecto túnel. Cálculos y medición de [7].

4.2.1. Programas y parámetros de cálculo

Los resultados de estructura electrónica y conductancia son obtenidos utilizando los paquetes SIESTA (basado en la DFT 1.3) y TRANSIESTA (extendiendo SIESTA a la función de Green 1.3.1), respectivamente.

SIESTA Para los cálculos que se presentan en la siguiente sección se ha empleado el código SIESTA [78], que soluciona las ecuaciones de Kohn-Sham mediante la aproximación de pseudopotenciales [102] y la expansión de las funciones de onda en orbitales pseudoatómicos localizados. El uso de orbitales localizados, aun a costa de la completitud en el espacio de Hilbert, permite abordar problemas de tamaño superior a los códigos basados en

¹Pero existe un debate sobre el origen de las fluctuaciones de densidad de carga. Por ejemplo, la disminución de la movilidad electrónica estaría mas relacionada a las impurezas de carga introducidas por el sustrato [101].

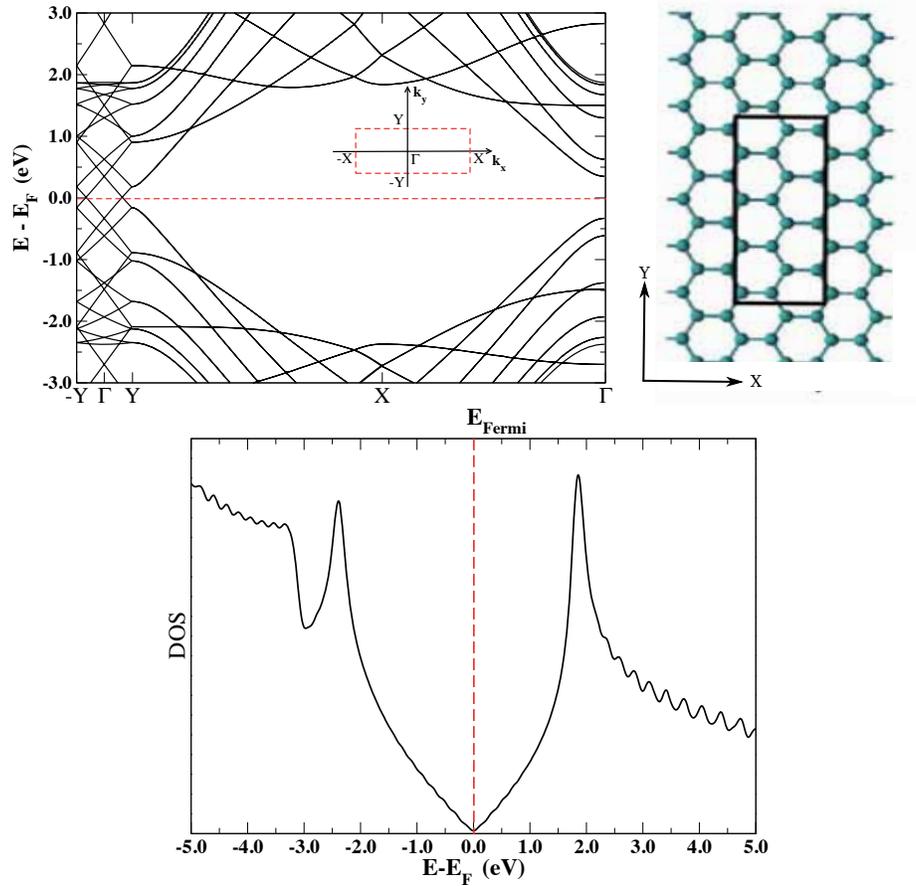


Figura 4.3: Imagen izquierda superior: Estructura de bandas del grafeno sin deformación, para una celda unitaria rectangular $L_x = 4a$ y $L_y = 5d/2$ donde $a=2.456 \text{ \AA}$ y $d=1.42 \text{ \AA}$. Tanto la estructura de bandas como la DOS (imagen inferior) muestran claramente la simetría entre la banda de conducción y valencia para energías entorno a la energía de Fermi (E_F)

ondas planas, sobretudo en nanoestructuras, ya que el vacío que debe rodearlas en alguna de las dimensiones se incluye casi sin coste computacional adicional, lo que no se da en el caso de las ondas planas.

Los cálculos se han realizado en la aproximación generalizada del gradiente (Generalized Gradient Approximation - GGA), en la parametrización de Perdew-Burke-Eszerhof [103]. Las estructuras se han relajado hasta que la fuerza sobre cada átomo era inferior a 0.04 eV/\AA , y las integraciones en el espacio recíproco se han realizado mediante un muestreo de Monkhorst-Pack [104] equivalente a una densidad de 20×20 o superior. Los pseudopotenciales, del tipo Troullier-Martins y que conservan la norma, tratan explícitamente los electrones 2s y 2p, y los radios de corte especificados para su generación son $r_c = 1,25 \text{ Bohr}$, sin corrección debida a no-linealidades en el *core*.

Con los parámetros técnicos arriba indicados, se obtiene una distancia C-C de 1.418 \AA

(experimental 1.42 \AA) y un parámetro de red de 2.456 \AA (experimental 2.46 \AA). El cálculo de estructura de bandas para el grafeno sin deformación es mostrado en la figura 4.3.

TRANSIESTA Es un método basado sobre la teoría del funcional densidad, y calcula en forma autoconsistente la estructura electrónica de nanoestructuras acopladas a dos electrodos tridimensionales, opcionalmente con diferente potencial electroquímico. Se utiliza la función de Green fuera del equilibrio, basándose en cálculos previos del paquete de estructura electrónica SIESTA [105].

4.2.2. Plegando el grafeno

El grafeno es una membrana con propiedades mecánicas muy interesantes tanto como por su resistencia al estrés como su facilidad para formar estructuras con geometrías muy exóticas (ver Figura 4.4). Esta plasticidad tiene su origen en la hibridización sp^2 , que genera enlaces covalentes muy fuertes entre los átomos de carbono. Sin embargo los orbitales responsables de interactuar con el sustrato son los p_z (perpendiculares al plano del grafeno). Estos orbitales son también responsables del transporte electrónico, razón por la cual es evidente como el sustrato puede afectar la conducción electrónica. No entanto esta interacción sustrato-grafeno puede generar estructuras como la mostrada en la figura 4.4, se observa como se logra obtener nanoondulaciones periódicas controladas por el sustrato. Actualmente la obtención de grafeno por MBE (*Molecular Beam Epitaxy*) a partir de

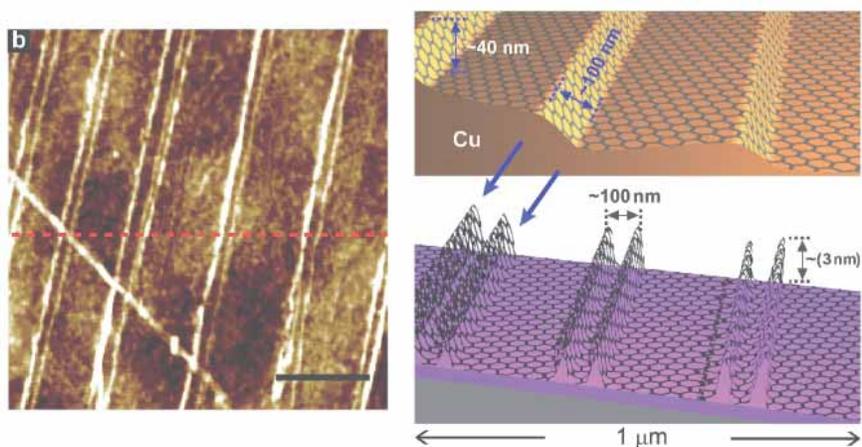


Figura 4.4: Imagen por microscopía de fuerza atómica de la morfología del grafeno sobre un sustrato de Si/SiO₂, la escala corresponde a $0.4 \mu\text{m}$ [8].

SiC posibilita tener estructuras similares a la mostrada en la figura 4.5. Sin embargo las investigaciones actuales del crecimiento de grafeno con esta geometría están asociadas a la producción de nanocintas [106].

A continuación mostramos la estructura inicial (geometría sin relajar) de las ondulaciones periódicas. Es interesante observar que la DOS y la relación de dispersión del grafeno

de este sistema, comienza a mostrar una asimetría para energías entorno al nivel de Fermi.

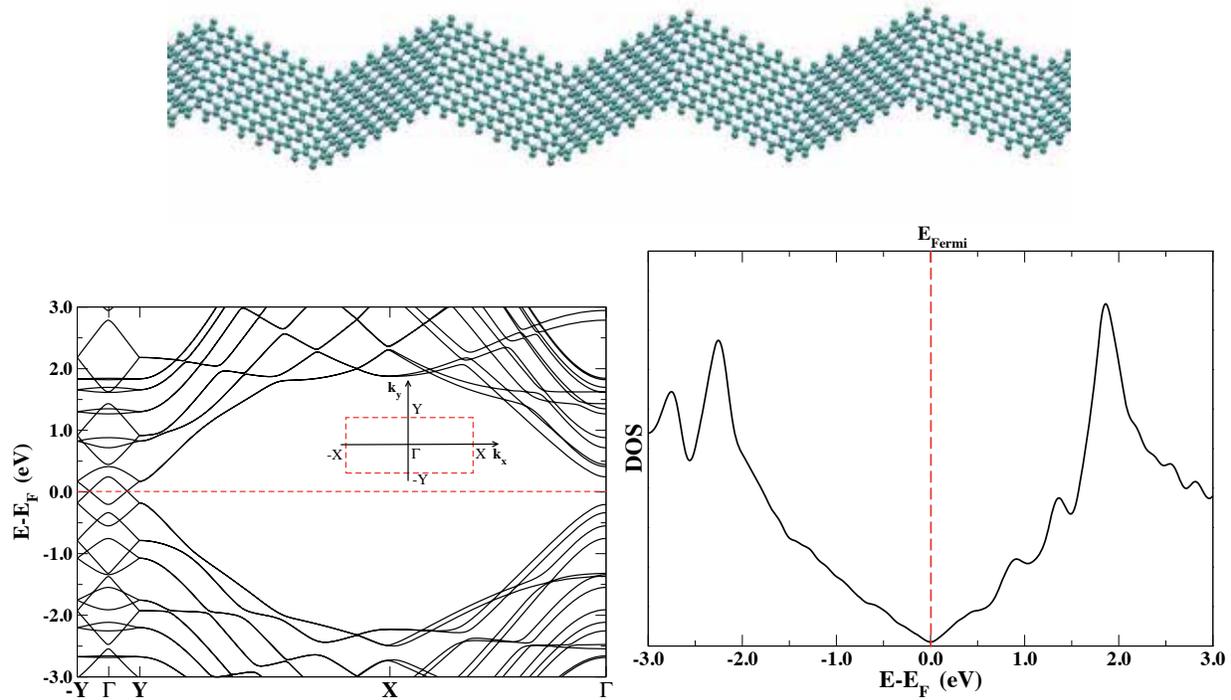


Figura 4.5: Estructura inicial de cálculo (previa a la relajación), El hecho mas llamativo es que la deformación no genera un gap en la estructura. Sin embargo la DOS muestra una asimetría entorno a la E_F . Esta geometría es similar a la morfología del sustrato de la Fig. 4.4.

Otra característica de la estructura es que la deformación es local (actúa solo en los pliegues) y está orientada en la dirección X . Esta especial disposición sugiere una anisotropía de las propiedades electrónicas. Sin embargo los cálculos de DOS no muestran variaciones importantes respecto a los cálculos de grafeno sin ondulación. Esto puede ser porque las dimensiones geométricas son grandes respecto a la longitud de onda de Fermi ($\lambda_F = 2\pi/\sqrt{\pi n}$, donde n es la concentración de portadores de carga del grafeno), especialmente para altas concentraciones. En el cálculo mostrado 4.5, la periodo de la nanoondulación es aproximadamente $25,1\text{Å}$ (experimentalmente son factibles estas dimensiones [107], habiendo llegado incluso a periodos del orden de 7Å [7]). Antes de continuar, es importante destacar que la plasticidad del grafeno que se puede observar en el proceso de relajación numérica (ver figura 4.6) y que genera geometrías complejas, es experimentalmente factible introduciendo anisotropías durante la síntesis o en el proceso de transferencia [108]. A este tipo de estructuras se les denomina *grafold*.

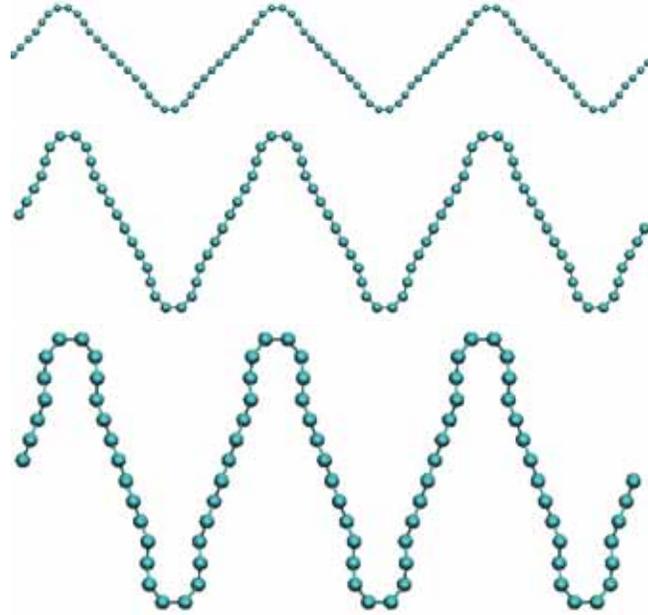


Figura 4.6: Evolución del proceso de relajación computacional. Si bien estas estructuras son artificiales, algunos experimentos muestran como al depositar el grafeno sobre substratos con geometrías definidas, generan estructuras similares a las mostradas en la Fig. 4.4.

4.2.3. Pseudo-espín y Estados en el nivel $n = 0$

Uno de los efectos sorprendentes de la presencia de arrugas, ondulaciones, nanoburbujas, etc. en el grafeno es que, bajo ciertas aproximaciones, pueden ser interpretadas como un campo *pseudomagnético* (cf. Sec. 4.1.2), que puede ser observado en la medida de la conductancia diferencial (dI/dV) [9] (ver figura 4.7). Su origen se encuentra en el estrés resultante de la deformación, que genera procesos de interferencia y dispersión de los estados electrónicos [109, 110].

Una característica del campo magnético en el grafeno es la formación de un nivel de energía para $n = 0$. Esto también es observado en las muestras con ondulaciones periódicas [111], y muchos trabajos teóricos también lo predicen [112]. El pseudo-campo magnético sigue una teoría quiral de Gauge donde a partir de un análisis de la distribución del estrés, podemos obtener un potencial vectorial. En nuestro caso la orientación cristalográfica de las ondulaciones periódicas, producen que el estrés actúe preferentemente en una dirección determinada (*zigzag* o *armchair*). De esta forma, en analogía a las nanocintas de grafeno, podemos identificar en los pliegues de la ondulaciones periódicas “bordes” *armchair* (ver figura 4.8 superior) o *zigzag* (ver figura 4.8 inferior). El primer efecto de la ondulación y orientación cristalográfica se encuentra en la modulación de la función de onda que ocurre al incrementar el ángulo de deformación. En el “borde” *armchair* observamos que los estados se localizan en los máximos y mínimos de la ondulación. Pero esto no ocurre en el “borde” *zigzag*, donde el estado electrónico se mantiene aproximadamente igualmente distribuido al

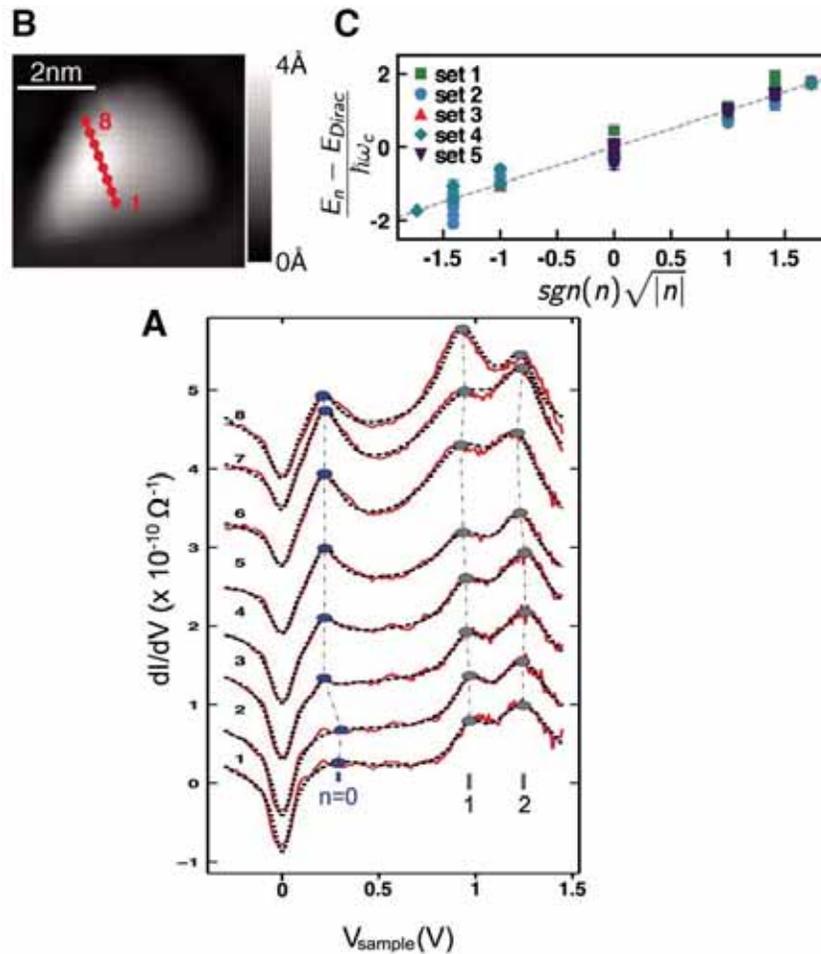


Figura 4.7: Secuencia de ocho espectros de dI/dV (imagen A), correspondientes a distintas posiciones en la “burbuja” de grafeno (imagen B). Se puede observar la similitud de los gráficos A y C con los mostrados en la Fig. 4.13 (referencia [9])

aumentar el ángulo de deformación. En nuestra simulación se observa que para un ángulo de 65 grados los orbitales de dos ondulaciones próximas se superponen.

Estos resultados sugieren que las nanoondulaciones inducen cambios en el comportamiento de función de onda que dependen tanto de la cristalografía y el grado de deformación. Esto está en concordancia con la teoría de gauge del campo pseudomagnético expuesto anteriormente (4.1.2) y la quiebra de simetría de la función de onda sugerida en la literatura [113].

En los resultados mostrados a continuación se considera que la deformación induce un borde tipo *armchair* (gráficos 4.9, 4.10, 4.11, 4.13 y 4.14). Los trabajos teóricos indican para esta orientación geométrica un campo de gauge $\mathbf{A}^q(\mathbf{r}) = [A_x^q(y), 0]$, que produce un pseudocampo magnético nulo $\mathbf{B}_z^q(\mathbf{r}) = 0$, que indica la no polarización del pseudospin. Esto es confirmado por nuestros cálculos en primeros principios. Sin embargo, al estudiar

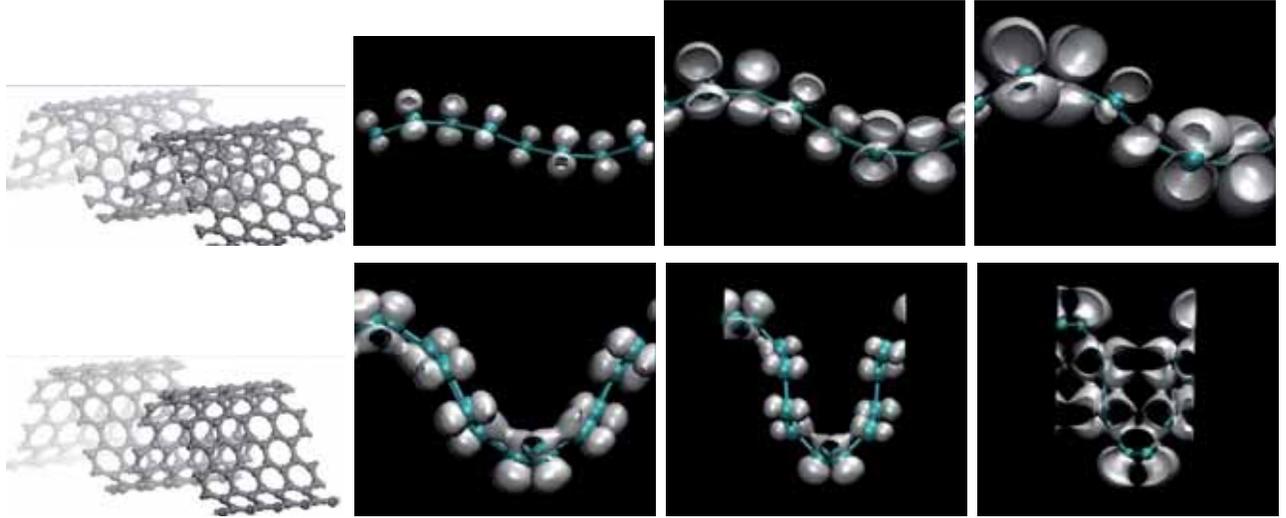


Figura 4.8: Visualización de la LDOS para una orientación cristalográfica *armchair* (imagen superior) y *zigzag* (imagen inferior) correspondientes a energías muy cercanas al nivel de Fermi. Las ondulaciones corresponden a diferentes ángulos de inclinación: $\theta = 20^\circ$, 25° y 30° para el caso *armchair*, y $\theta = 45^\circ$, 60° y 65° para el caso *zigzag*. Las nanoondulaciones expuestas también han sido sugeridas en otros trabajos similares [10]

la estructura de bandas, DOS y conductancia, para diferentes ángulos de deformación, encontramos para $\theta = 30^\circ$ un nivel ($n = 0$) en la energía de Fermi (similar al nivel de Landau). Esto produce la formación de un pico en la DOS, muy característico de los estados localizados, pero la caída con el incremento de energía es similar a los estados cuasi-unidimensionales estudiados en la introducción (ver 1.4). Todo ello sugiere que los estados están confinados en la dirección **Y** y extendidos en la dirección **X**.

Observando en detalle la secuencia de estructuras de bandas de las Figs. 4.9-4.11, tenemos que la banda que cruza linealmente el nivel de Fermi en la línea $\Gamma - Y$ reduce progresivamente su altura hasta la formación del nivel $n = 0$, mientras que en la línea $\Gamma - X$ se mantiene dispersión parabólica (similar a la de un electrón libre $E(k) \approx k_x^2$). La conductancia confirma este comportamiento en la dirección X ; sin embargo, la cuantización no es completa ya que se observa una dispersión residual de las bandas en $\Gamma - Y$.

Finalmente se tiene una clara correlación entre el incremento de la deformación y la presencia de una banda plana entorno a la energía de Fermi. Asociada a esta la DOS muestra la formación de un pico que se define bien para $\theta = 30^\circ$. Esto ha sido descrito en la literatura, pero la presencia de una conductancia con claros indicios de cuantización no ha sido indicada previamente.

Estos resultados nos indican que puede existir en la estructura con ondulación canales de transporte cuasibalísticos. De esta forma, para una ondulación de con inclinación de $\theta = 30^\circ$, las funciones de onda pueden escribirse como $\psi(k_x, k_y) = \phi_{n_0}^y v^x(k_x)$, correspondientes a un estado localizado en la dirección Y (para $E(n = 0)$), y a un estado cuántico propagándose en X .

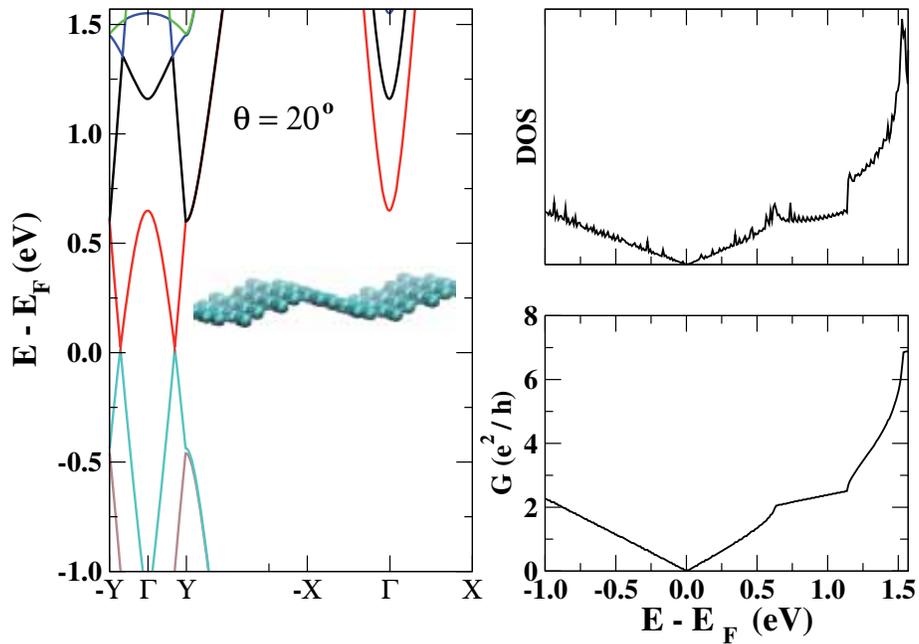


Figura 4.9: Cálculo de estructura de bandas para una ondulación de $\theta = 20^\circ$, $L = 9,25 \text{ \AA}$ y $H = 1,07 \text{ \AA}$.

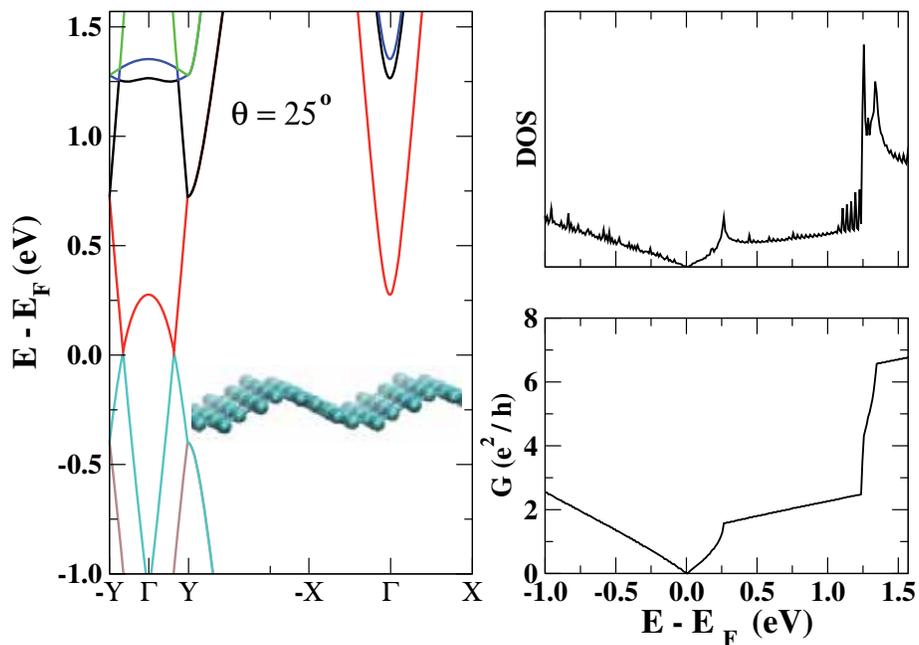


Figura 4.10: Cálculo de estructura de bandas para una ondulación de $\theta = 25^\circ$, $L = 8,92 \text{ \AA}$ y $H = 1,52 \text{ \AA}$.

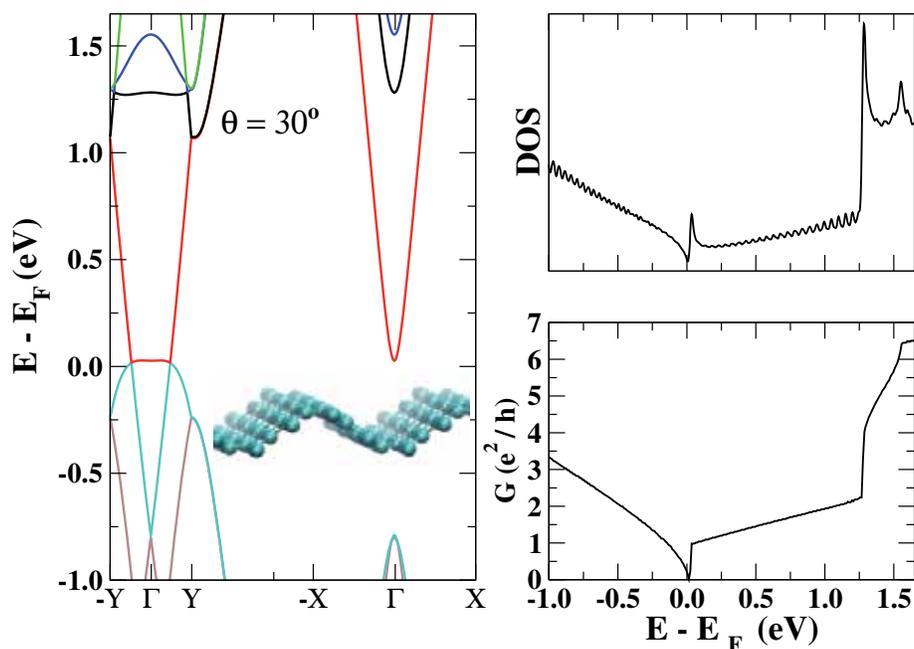


Figura 4.11: Cálculo de estructura de bandas para una ondulación de $\theta = 30^\circ$, $L = 8,52 \text{ \AA}$ y $H = 1,92 \text{ \AA}$.

4.3. Transporte cuántico cuasi-unidimensional de electrones

Los estados unidimensionales son de gran interés por su riqueza de fenómenos físicos y por presentar cuantización en su conductancia electrónica. Estos sistemas, también presentes en nanotubos de carbono o nanocintas de grafeno, actualmente son muy estudiados por su potencial aplicación en Transistores de Efecto Campo. Sus propiedades electrónicas

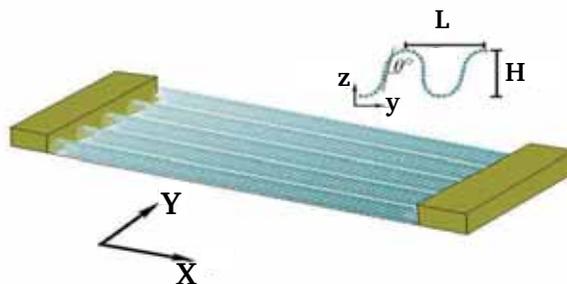


Figura 4.12: Disposición geométrica de los contactos. La dirección de transporte es paralela al eje X , donde H es la altura y L la longitud de onda de la nanoondulación.

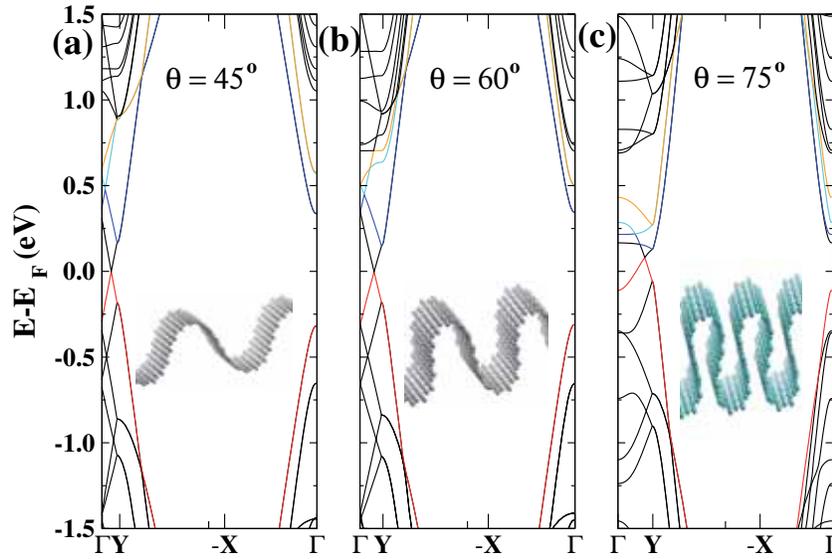


Figura 4.13: Dependencia de la estructura de banda con el *folding* del grafeno.

cas están fuertemente influidas por la estructura cristalina, teniendo un comportamiento metálico o semiconductor de acuerdo a la quiralidad del nanotubo o al borde y ancho de la nanocinta (principalmente Zigzag o Armchair). Como indicamos en la sección anterior, es factible obtener nanoondulaciones periódicas en forma experimental, e incluso obtener superredes de *grafold*.

Si mantenemos la misma dirección cristalográfica utilizada anteriormente y realizamos medidas de transporte electrónico [8], es posible obtener una cuantización clara de la conductancia que corresponde a estados cuasi-unidimensionales que se propagan con vector de onda k_x . En la figura 4.12 mostramos la disposición de los contactos para la medidas de transporte cuántico.

Variaciones en la longitud de onda de la nanoondulación producen cambios en la estructura de bandas como se puede ver en la figura 4.13. Los parámetros de longitud de onda (\mathbf{L}) y altura (\mathbf{H}) son: $\theta = 45^\circ$, $\mathbf{L} = 24,35 \text{ \AA}$ y $\mathbf{H} = 10,65 \text{ \AA}$; $\theta = 60^\circ$, $\mathbf{L} = 17,22 \text{ \AA}$ y $\mathbf{H} = 12,77 \text{ \AA}$; y $\theta = 75^\circ$, $\mathbf{L} = 8,91 \text{ \AA}$ y $\mathbf{H} = 13,88 \text{ \AA}$. Se puede observar una mayor curvatura y uniformidad en la distribución del estrés. Para ángulos (iniciales) mayores a $\theta = 75^\circ$ el grafeno se pliega cambiando la relación de dispersión en forma importante (se obtiene un *bi-layer*). De forma adicional tenemos que mediante el aislamiento de cada ondulación se pueden obtener canales de transporte unidimensionales (Fig. 4.14), con potencial utilidad en electrodos o en pantallas flexibles. La presencia de canales de transporte unidimensionales se justifica a partir de la estructura de bandas, donde se observan bandas que dispersan a lo largo de la dirección de transporte, pero que tienen todas componente k_y imaginaria en los rangos energéticos entre las líneas quebradas, indicando la imposibilidad de la propagación a largas distancias en la dirección Y , por lo que el transporte es puramente unidimensional.

Con el fin de explorar la formación de estados con cuantización de conductancia en

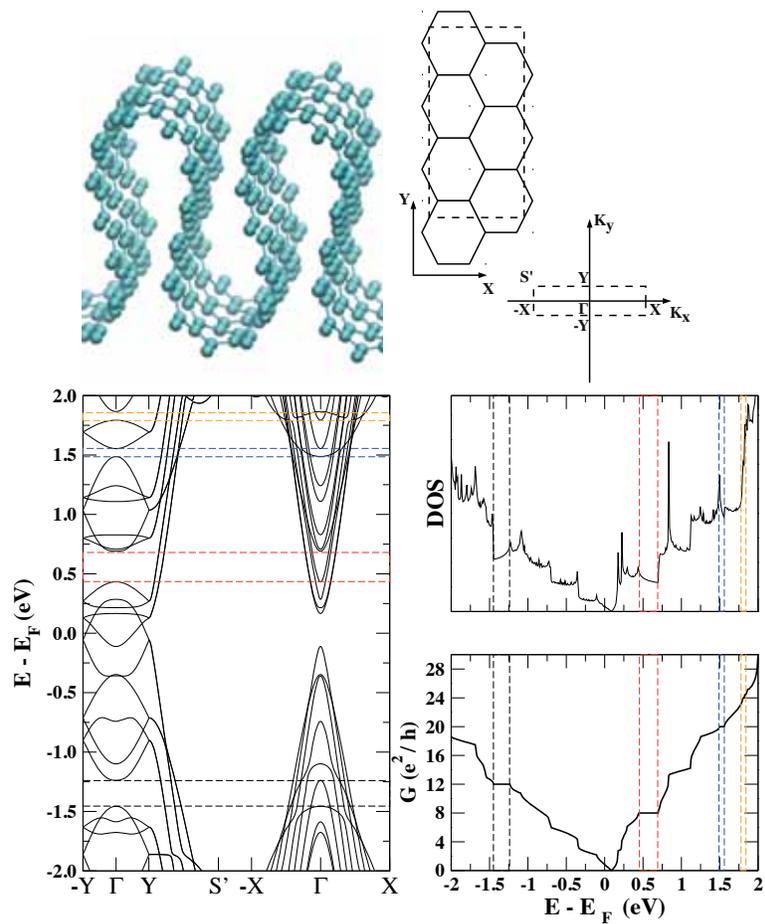


Figura 4.14: Cálculos de la estructura de bandas, DOS y conductancia para una estructura ondulada con “borde” *armchair* con un ángulo inicial de $\theta = 75^\circ$. El cálculo de la conductancia muestra una cuantización bien definida para energías entorno a $\mathbf{E} - \mathbf{E}_F = -1,4\text{eV}$, $0,5\text{eV}$, $1,5\text{eV}$ y $1,75\text{eV}$

nanoondulaciones periódicas con "borde" *zigzag*, se realizó un cálculo adicional para una deformación de $\theta = 70^\circ$ (Fig. 4.15). La figura 4.14 es análoga a la figura 4.15, excepto que la hoja de grafeno se ha girado 90° antes de aplicar la corrugación, de modo que ahora el transporte es a lo largo de la dirección Y (*zigzag*), mientras que la hoja se ha corrugado a lo largo de la dirección X . De nuevo se observan regiones sospechosas de comportamiento unidimensional, señaladas por las líneas quebradas negras, rojas y azules, aunque su interpretación a partir del diagrama de bandas es más dificultosa debido a que no se observan características únicas en las regiones energéticas de conductancia cuantizada. En todo caso, los resultados tanto para *armchair* como para *zigzag* pueden ser útiles para explicar mapas de corriente con C-AFM donde se encuentra alta conductividad en arrugas [114].

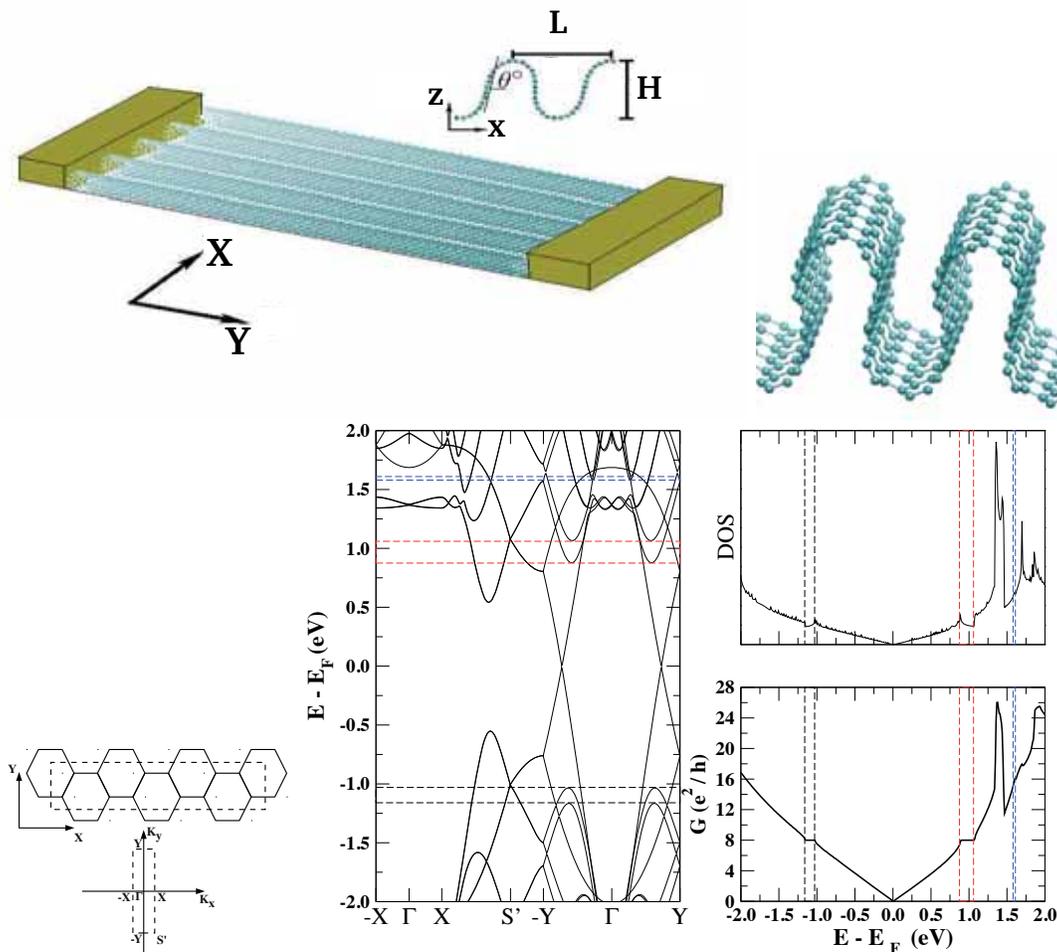


Figura 4.15: (Gráfico superior) Disposición geométrica de los contactos para una orientación con "borde" *zigzag*. Cálculo de la estructura de bandas, DOS y conductancia para una estructura ondulada con ángulo de $\theta = 70^\circ$. La conductancia muestra una cuantización bien definida para energías entorno a $E - E_F = -1,0\text{eV}$, $1,0\text{eV}$ y $1,5\text{eV}$.

Capítulo 5

Conclusiones

Las características estructurales y electrónicas únicas del grafeno hacen de él un sistema candidato a poder observar con relativa facilidad fenómenos cuánticos en el transporte electrónico. En esta tesis se han tratado tres de ellos mediante metodologías variadas, como son los efectos de intercambio en sistemas de muchos cuerpos interactuantes (con trayectorias de Bohm), la inyección de electrones en grafeno respetando el principio de exclusión de Pauli, y la formación de estados cuasi-unidimensionales en grafeno corrugado (con teoría del funcional densidad).

Los dos primeros desarrollos permiten avanzar en el análisis del transporte electrónico fuera del equilibrio y dependiente del tiempo, que es un tema de actual investigación que presenta una interesante fenomenología, aunque también dificultades importantes tanto de cálculo como conceptuales. El tercer desarrollo pretende avanzar en la consecución del transporte unidimensional en estructuras basadas en grafeno sin necesidad de recurrir al grabado del grafeno, ya que los bordes presentes, por ejemplo, en las nanocintas son importantes fuentes de *scattering*.

Entre las conclusiones encontradas podemos indicar:

- En el capítulo II hemos presentado un modelo para capturar las características de partículas con interacción de intercambio a través de funciones condicionales 1D. Hemos discutido cómo es el comportamiento de las trayectorias Bohmianas debido a la interacción de intercambio. En particular, las trayectorias son perfectamente distinguibles, pero los resultados que medimos (por ejemplo, la energía cinética) para la partícula 1 son idénticos que para la partícula 2. Esta conclusión, en sí, es un resultado que también obtenemos clásicamente. La diferencia clásica-cuántica está en que como la probabilidad cuántica se encuentra a partir de la función de onda, las funciones de onda de partículas idénticas son especiales y deben tener simetría de intercambio. Estas funciones de onda particulares hacen que las trayectorias de Bohm tengan algunas características especiales: tanto bosones como electrones no cruzan los puntos diagonales (esta última característica no debe confundirse con el principio de Pauli).
- En el capítulo III se ha presentado un nuevo argumento para calcular la densidad de

estados para paquetes de ondas (sin utilizar estados estacionarios). A partir de este resultado se ha definido el concepto de densidad de flujo (DOF) y se ha utilizado para desarrollar un nuevo modelo de inyección de electrones en grafeno para simulaciones dependientes del tiempo. Todo este capítulo versa sobre la necesidad de utilizar paquetes de ondas para la correcta modelización del transporte electrónico en el caso general, y de aspectos de alta frecuencia en particular. Este camino explorado en este capítulo abre algunas incógnitas como cuál es el tamaño de los paquetes electrónicos que describen un electrón de transporte. En la Fig. 3.11 se presenta como se puede atacar esta cuestión a partir del ruido del grafeno. El grafeno presenta la peculiaridad de que todos los electrones, prácticamente, entran en el dispositivo con la misma velocidad, al mismo ritmo. Esto no sucede para el silicio. Entonces, entre dos inyecciones consecutivas de electrones en grafeno hay una gran correlación que se aprecia en la Fig. 3.11. A partir de t_o se puede determinar fácilmente un valor aproximado del soporte de la paquete de ondas del electrón en la dirección de transporte.

- En el capítulo IV hemos visto que el estudio del transporte electrónico en nanoestructuras periódicas de grafeno muestra una anisotropía debido a que la deformación produce una distribución uniforme del estrés, que afecta la simetría de la red generando estados de borde análogos a los presentados en las nanocintas. De acuerdo con las medidas experimentales y cálculos previos basados en Hamiltonianos modelo, encontramos la formación de un nivel de energía para $n = 0$ para una orientación cristalográfica *armchair*, en el que no se observa polarización de pseudospin. Es más sorprendente la ausencia del nivel en $n = 0$ para ondulaciones *zigzag*, donde los cálculos de LDOS presentan indicios de polarización de pseudospin.

Otro resultado no previsto es la cuantización de la conductancia, observada para ambas orientaciones cristalográficas. Esto puede indicar la formación de canales de corriente a lo largo de las ondulaciones, lo que explicaría porqué ciertos mapas de corriente obtenidos por microscopía AFM muestran en las arrugas alta conductividad.

Esta tesis abre nuevas perspectivas para el estudio del transporte cuántico en dispositivos nanoscópicos con muchos electrones interactuando.

Apéndice A

Demostración de la indistinguibilidad

Los requerimientos de Eq. (2.4) es suficiente para el *indistinguishability* de resultados del *ensemble* calculado a partir de la función de onda. El requerimiento de la *indistinguishability* del *ensemble* resultante, calculado de las trayectorias de Bohm es que la trayectoria de Bohm de las N partículas son simétricas sobre el intercambio de sus posiciones iniciales. En este apéndice, nosotros mostramos que las propiedades anteriores están garantizadas por nuestra propuesta de usar Eq. (2.27) para fijar el desconocido ángulo $z_{p(l)j,a}(t)$.

En el tiempo inicial, por construcción, es obvio que Eq. (2.28) provee trayectorias de Bohm con la deseada propiedad porque nosotros consideramos, solo en el tiempo inicial, la función de onda separable. Nosotros consideramos, dos diferentes N-partículas trayectorias de Bohm: $\vec{X}^j[t]$ and $\vec{X}^f[t]$. tal diferentes trayectorias tienen de hecho, muchas idénticas componentes excepto dos. Nosotros tenemos $\vec{r}_k^j[t'] = \vec{r}_k^f[t'] = \vec{r}_k[t']$ for all k except $\vec{r}_i^j[t'] = \vec{r}_h^f[t'] = \vec{r}_\alpha[t']$ y $\vec{r}_h^j[t'] = \vec{r}_i^f[t'] = \vec{r}_\beta[t']$. Nos demuestra que esta relación en el tiempo t' es también verdadera en el tiempo $t' + dt$. En efecto, nosotros no solo tenemos que demostrar que la velocidad de la partícula i y h en t' son intercambiadas. De acuerdo a Eq. (2.28), la función de onda condicional usa para el cálculo la velocidad $\vec{v}_i(\vec{X}, t')|_{\vec{X}=\vec{X}^j[t']}$ con la posición inicial $\vec{X}^j[t'] = \{\vec{r}_1[0], \dots, \vec{r}_\alpha[0], \dots, \vec{r}_\beta[0], \dots\}$ es:

$$\begin{aligned} \Psi_i^j(\vec{r}_i, t) &= C \sum_{l=1}^{N!} \tilde{\Psi}_{p(l)j,\alpha}(\vec{r}_1[t], t), \dots, \tilde{\Psi}_{p(l)j,\alpha}(\vec{r}_i, t) \\ &\quad , \dots, \tilde{\Psi}_{p(l)j,\alpha}(\vec{r}_\beta[t], t), \dots, \tilde{\Psi}_{p(l)j,\alpha}(\vec{r}_N[t], t) \\ &\quad \times \text{sign}(\vec{p}(l)), \end{aligned} \tag{A.1}$$

y $\vec{v}_h(\vec{X}, t')|_{\vec{X}=\vec{X}^j[t']}$ es:

$$\begin{aligned} \Psi_h^j(\vec{r}_h, t) &= C \sum_{l=1}^{N!} \tilde{\Psi}_{p(l)j,\beta}(\vec{r}_1[t], t), \dots, \tilde{\Psi}_{p(l)j,\beta}(\vec{r}_\alpha[t], t) \\ &\quad , \dots, \tilde{\Psi}_{p(l)j,\beta}(\vec{r}_h, t), \dots, \tilde{\Psi}_{p(l)j,\beta}(\vec{r}_N[t], t) \\ &\quad \times \text{sign}(\vec{p}(l)). \end{aligned} \tag{A.2}$$

Por lo contrario, para muchas partículas la trayectoria de Bohm con iniciales condiciones $\vec{X}^f[t'] = \{\vec{r}_1[0], \dots, \vec{r}_\beta[0], \dots, \vec{r}_\alpha[0] \dots\}$, we have for $\vec{v}_i(\vec{X}, t')|_{\vec{X}=\vec{X}^f[t']}$:

$$\begin{aligned} \Psi_i^f(\vec{r}_i, t) &= C \sum_{l=1}^{N!} \tilde{\Psi}_{p(l)_j, \beta}(\vec{r}_1[t], t), \dots, \tilde{\Psi}_{p(l)_j, \beta}(\vec{r}_i, t) \\ &\quad, \dots, \tilde{\Psi}_{p(l)_j, \beta}(\vec{r}_\alpha[t], t) \dots, \tilde{\Psi}_{p(l)_j, \beta}(\vec{r}_N[t], t) \\ &\times \text{sign}(\vec{p}(l)). \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

y para $\vec{v}_h(\vec{X}, t')|_{\vec{X}=\vec{X}^f[t']}$:

$$\begin{aligned} \Psi_h^f(\vec{r}_h, t) &= C \sum_{l=1}^{N!} \tilde{\Psi}_{p(l)_j, \alpha}(\vec{r}_1[t], t), \dots, \tilde{\Psi}_{p(l)_j, \alpha}(\vec{r}_\beta[t], t) \\ &\quad, \dots, \tilde{\Psi}_{p(l)_j, \alpha}(\vec{r}_h, t) \dots, \tilde{\Psi}_{p(l)_j, \alpha}(\vec{r}_N[t], t) \\ &\times \text{sign}(\vec{p}(l)). \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Como esperamos, es obvio que $\vec{v}_i^j(\vec{r}_i, t') = \vec{v}_h^f(\vec{r}_h, t')$ and $\vec{v}_h^j(\vec{r}_h, t') = \vec{v}_i^f(\vec{r}_i, t')$. El uso de la expresión Eq. (2.28) también proporciona la propiedad adicional $\Psi_i^j(\vec{r}_i, t)$ se convierte en cero cuando $\vec{r}_i = \vec{r}_k[t]$ para $i \neq k$. Entonces, Eq. (A.1) es básicamente la determinante de una matriz con dos columnas idénticas. Puede también ser demostrado que $\exp(z_{\vec{p}(l), \alpha}(t)) = \prod_{k=1, k \neq \alpha}^N \tilde{\Psi}_{p(l)_j, k}(\vec{r}_k[t], t)$ también proporcionan la condición de simetría requeridas para las trayectorias, pero esto no garantiza que la función de onda condicional es cero para fermiones en los puntos coincidentes. Por lo tanto, Eq. (2.27) es preferido.

Apéndice B

Probabilidad de presencia de dos fermiones idénticos descritos por la ecuación Dirac a 1D

Primeramente desarrollamos la ecuación de Dirac para un fermion sin massa (para masa $m=0$).

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \{v_F \hat{\alpha} \cdot \vec{p}\} \Psi \quad (\text{B.1})$$

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \hat{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{p} = \hbar \vec{k}$$

Solución de ondas planas

$$\Psi^+ = \begin{pmatrix} u_1^+ \\ u_2^+ \end{pmatrix} e^{i(kz - \omega^+ t)}, \quad \hbar \omega^+ = E^+ = +v_F |p|$$

$$u_1^+ = \frac{E^+}{\sqrt{2}|E^+|} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad u_2^+ = \frac{v_F p}{\sqrt{2}|E^+|} = \frac{k}{\sqrt{2}|k|}$$

$$\Psi^- = \begin{pmatrix} u_1^- \\ u_2^- \end{pmatrix} e^{i(kz - \omega^- t)}, \quad \hbar \omega^- = E^- = -v_F |p|$$

$$u_1^- = \frac{-v_F p}{\sqrt{2}|E^-|} = \frac{-k}{\sqrt{2}|k|}, \quad u_2^- = \frac{-E^-}{\sqrt{2}|E^-|} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\Psi^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{k}{|k|} \end{pmatrix} e^{i(kz - v_F |k| t)} \quad E > 0, \quad \frac{k}{|k|} = \begin{cases} 1 & ; \quad k > 0 \\ -1 & ; \quad k < 0 \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

$$\Psi^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{-k}{|k|} \\ 1 \end{pmatrix} e^{i(kz + v_F |k| t)} \quad E < 0, \quad \frac{k}{|k|} = \begin{cases} 1 & ; \quad k > 0 \\ -1 & ; \quad k < 0 \end{cases} \quad (\text{B.3})$$

Construimos un paquete de onda Gaussiano como una superposición de ondas planas del espectro de energía positiva B.2 en espacio de *momentum*:

$$\Psi_e(k, 0) = \sqrt{\hat{G}(k - k_o; \sigma_k)} e^{-iz_o k} \begin{pmatrix} u_1^+(k) \\ u_2^+(k) \end{pmatrix} e^{iz_o k_o} \quad (\text{B.4})$$

$$u_i^\pm(k) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(k - k_o)^n}{n!} \frac{d^n}{dk^n} u_i^\pm \Big|_{k=k_o}$$

$$u_i^\pm(k) = u_i^\pm(k_o) + \frac{d}{dk} u_i^\pm \Big|_{k=k_o} (k - k_o) + \dots$$

$$\frac{d}{dk} u_1^+ = 0 \quad \frac{d}{dk} u_1^- = 0$$

$$\frac{d}{dk} u_2^+ = 0 \quad \frac{d}{dk} u_2^- = 0$$

$$\hat{\mathbf{u}}^\pm(k) = \begin{pmatrix} u_1^\pm(k) \\ u_2^\pm(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1^\pm(k_o) \\ u_2^\pm(k_o) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1^\pm \\ u_2^\pm \end{pmatrix}$$

$$\frac{d}{dk} u^\pm(k) = 0$$

$$\mathcal{F} \{ i^n k^n \hat{F}(k) \} = \left(\frac{d}{dz} \right)^n \mathcal{F}^{-1} \{ \hat{F}(k) \}$$

$$\Psi_e(k, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left\{ \left(\frac{d}{dk} \right)^n \begin{bmatrix} u_1^+(k) \\ u_2^+(k) \end{bmatrix} \right\}_{k=k_o} (k - k_o)^n \sqrt{\hat{G}(k - k_o; \sigma_k)} e^{-iz_o(k - k_o)} \quad (\text{B.5})$$

$$\Psi_e(k, 0) = \left\{ \begin{bmatrix} u_1^+(k_o) \\ u_2^+(k_o) \end{bmatrix} \sqrt{\hat{G}(k - k_o; \sigma_k)} \right\} e^{-iz_o(k - k_o)}$$

$$\hat{G}(k; \sigma_k = \sqrt{2}\sigma_k^*) = \frac{1}{\sqrt{\pi}(\sqrt{2}\sigma_k^*)} \exp \left[-\frac{(k)^2}{(\sqrt{2}\sigma_k^*)^2} \right] = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma_k^2} \exp \left[-\frac{(k)^2}{\sigma_k^2} \right]$$

$$\hat{G}(z; \sigma_z = \sqrt{2}\sigma_z^*) = \frac{1}{\sqrt{\pi}(\sqrt{2}\sigma_z^*)} \exp \left[-\frac{(z)^2}{(\sqrt{2}\sigma_z^*)^2} \right] = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma_z^2} \exp \left[-\frac{(z)^2}{\sigma_z^2} \right]$$

$$\sigma_z \sigma_k = 1$$

$$\Psi_e(k, 0) = \left\{ \begin{bmatrix} u_1^+(k_o) \\ u_2^+(k_o) \end{bmatrix} \sqrt{\hat{G}(k - k_o; \sigma_k)} \right\} e^{[-iz_o(k-k_o)]}$$

$$\Psi_e(z, 0) = \left\{ \begin{bmatrix} u_1^+(k_o) \\ u_2^+(k_o) \end{bmatrix} \sqrt{\hat{G}(z - z_o; \sigma_z)} \right\} e^{ik_o z}$$

$$\Psi_e(k, 0) = \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{k}{|k|} \end{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi\sigma_k^2}} \exp\left[-\frac{(k - k_o)^2}{\sigma_k^2}\right]} \right\} e^{[-iz_o(k-k_o)]}$$

A continuación, escribimos la función de onda antisimétrica para dos electrones idénticos (Por simplicidad, solo describimos la parte orbital asumiendo que los espines són idneticos y no tienen repercusión en la antisimetria de la función total).

$$\Phi = \Psi_e(z_1, k_{o1}, z_{o1}; 0) \Psi_e(z_2, k_{o2}, z_{o2}; 0) - \Psi_e(z_2, k_{o1}, z_{o1}; 0) \Psi_e(z_1, k_{o2}, z_{o2}, 0)$$

$$\begin{aligned} \Phi &= \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{k}{|k|} \end{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi\sigma_{z_1}^2}} \exp\left[-\frac{(z_1 - z_{o1})^2}{\sigma_{z_1}^2}\right]} \right\} e^{ik_{o1}z_1} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{k}{|k|} \end{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi\sigma_{z_2}^2}} \exp\left[-\frac{(z_2 - z_{o2})^2}{\sigma_{z_2}^2}\right]} \right\} e^{ik_{o2}z_2} \\ &- \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{k}{|k|} \end{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi\sigma_{z_2}^2}} \exp\left[-\frac{(z_2 - z_{o1})^2}{\sigma_{z_2}^2}\right]} \right\} e^{ik_{o1}z_2} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{k}{|k|} \end{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi\sigma_{z_1}^2}} \exp\left[-\frac{(z_1 - z_{o2})^2}{\sigma_{z_1}^2}\right]} \right\} e^{ik_{o2}z_1} \end{aligned}$$

Una vez construida la función de onda antisimétrica, calculamos la norma mediante la doble integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^\dagger(z_1, z_2; t=0) \Phi(z_1, z_2; t=0) dz_1 dz_2$$

y considerando $\sigma_{z1} = \sigma_{z1}$ obtenemos finalmente, despues de unas paso laboriosos pero evidentes, el siguiente resultado:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Phi(z_1, z_2; t=0)|^2 dz_1 dz_2 = 2 \left(1 - e^{-\frac{(z_{o1}-z_{o2})^2}{2\sigma^2} - \frac{(k_{o1}-k_{o2})^2\sigma^2}{2}} \right).$$

Se obtiene exactamente el mismo resultado que habiamos obtenido en la tesis para sistemas mas simples descritos para bandas parabolicas. Ver Eq. 3.13. De nuevo podemos definir el vector $d(1, 2)$ a través de la Eq. 3.14 donde $\sigma_k = 1/\sigma$ seria la dispersión de los vectores de onda del paquete.

Apéndice C

Lista de publicaciones y congresos

CAPÍTULOS DE LIBROS

- G.Albareda, D.Marian, A.Benali, A. Alarcón, S. Moises and X.Oriols, *Electron devices simulation with Bohmian trajectories* Puplicación: Simulation of electron transport Editorial: ISTE-Wiley, London,2013 ISBN:in press

ARTÍCULOS EN REVISTAS INTERNACIONALES

- Jean-Pierre Gauyacq, Simeón Moisés Yaro, Xavier Cartoixà, and Nicolás Lorente *Correlation-Mediated Processes for Electron-Induced Switching between Néel States of Fe Antiferromagnetic Chains* Phys. Rev. Lett. 110, 087201 (2013)
- Luis I A López, Simeón Moisés Yaro, A Champi, Sebastian Ujevic and Michel Mendoza. *Optimization of the polarized Klein tunneling currents in a sub-lattice: pseudo-spin filters and latticetronics in graphene ribbons* J. Phys.: Condens. Matter 26 065301 (2014)
- A. Alarcón, S. Yaro, X.Cartoixà and X. Oriols *Computation of many-particle quantum trajectories with exchange interaction: Application to the simulation of nanoelectronic devices.* Journal of Physics: Condensed Matter. 25, 325601 (2013)
- G. Albareda, D. Marian, A. Benali, A. Alarcón, S.Moises, N.Zanghi and X. Oriols *Time-resolved electron transport with quantum trajectories* Journal of Computational Electronics ,12(3), 405-419 (2013) Special issue on: Quantum trsansport beyond DC

PARTICIPACIÓN O ASISTENCIA A CONGRESOS INTERNACIONALES

- Simeón M.Yaro and Xavier Cartoixà *Quasi-one-dimensional states in rippled graphene* Congreso: "Graphene 2011". Localidad: Bilbao (Spain), Fecha April 11-14, 2011, Contribución: Poster.
- S.M.Yaro and Xavier Cartoixà *Local strains and gap formation in graphene* Congreso: "Graphene 2011", Localidad: Bilbao (Spain), Fecha: April 11-14, 2011, Contribución: Poster.
- X.Oriols, F.L.Traversa, G.Albareda, A.Benali, A. Alarcón, S. M. Yaro, X.Cartoixà *Multi-time measurement and displacement current in time-dependent quantum transport* Publicación: Proceedings of the International Workshop on Computational Electronics Congreso: IWCE 2012, Localidad: Madison Wisconsin (USA), Fecha: May 2012.
- X.Oriols, A.Benali, G.Albareda, S. M. Yaro, F.L. Traversa, J.Mateos and T.Gonzalez *Accurate predictions of Terahertz noise in ultra-small quantum devices: A limiting factor for their commercial viability?* Congreso: "22 ICNF International Conference on Noise and Fluctuations", Localidad: Montpellier(FRANCE), Fecha: 24-28 June 2013.
- S.M.Yaro and X.Oriols *Understanding graphene phase-space structure from high-frequency current fluctuations* Congreso: "Graphene 2014", Localidad: Toulouse(FRANCE), Fecha: 6-9 May 2014, Contribución: Poster.
- S. M. Yaro and X.Oriols *Electron injection model for graphene: Is it much different from parabolic-band ones?* Congreso: "17th International Workshop on Computational Electronics", Localidad: Paris(FRANCE), Fecha: 2-6 June 2014, Contribución: Poster.

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

- ENTIDAD FINANCIADORA: Dirección General de Investigación Científica y Técnica. Nº DE PROYECTO: TEC2012-31330. TITULO DEL PROYECTO: "DISPOSITIVOS ELECTRONICOS DE BAJA DIMENSIONALIDAD PARA APLICACIONES DE RADIOFRECUENCIA Y DIGITALES: SIMULACION Y DESARROLLO DE SOFTWARE". DURACIÓN: desde 2013 hasta 2016. INVESTIGADOR PRINCIPAL: Xavier Oriols.
- ENTIDAD FINANCIADORA: Dirección General de Investigación Científica y Técnica. Nº DE PROYECTO: TEC2009-06986. TITULO DEL PROYECTO: "Simula-

ción del transporte de Electrones y sus correlaciones cuánticas en dispositivos nanométricos”. DURACIÓN: desde 2010 hasta 2013. INVESTIGADOR PRINCIPAL: Xavier Oriols.

- ENTIDAD FINANCIADORA: Comunidad Europea. N° DE PROYECTO:Europes first 10-year FET Graphene flagships. TITULO DEL PROYECTO: ” Graphene-Driven Revolutions in ICT and Beyond”. DURACIÓN: desde 2013 hasta 2015. INVESTIGADOR PRINCIPAL general coordinator of the project is Jari Kinaret (jari.kinaret@chalmers.se). INVESTIGADOR PRINCIPAL UAB: David Jiménez.

Bibliografía

- [1] Louis-Victor de Broglie. On the theory of quanta. *Ann. de Phys.*, 10^e série:t. III, Janvier-Février 1925.
- [2] D. M. Harris et al. The pilot-wave dynamics of walking droplets. *Phys. Fluids*, 25:091112, 2013.
- [3] Niels Ubbelohde et al. Measurement of finite-frequency current statistics in a single-electron transistor. *Nature Communications*, 3:612, 2012.
- [4] Lundberg et al. Analysis of electron transport in a two-dimensional structure using quantal trajectories. *J. Phys.: Condens. Matter*, 10:5583, 1998.
- [5] S.M.Yaro and X.Oriols, submitted.
- [6] Eva Y Andrei et al. Electronic properties of graphene: a perspective from scanning tunneling microscopy and magnetotransport. *Rep. Prog. Phys.*, 75:056501, 2012.
- [7] Levente Tapasztó et al. Breakdown of continuum mechanics for nanometre-wavelength rippling of graphene. *Nature Physics*, 8:739742, 2012.
- [8] Guang-Xin Ni et al. Quasi-periodic nanoripples in graphene grown by chemical vapor deposition and its impact on charge transport. *ACS Nano*, 6:11581164, 2012.
- [9] N. Levy et al. Strain-induced pseudomagnetic fields greater than 300 tesla in graphene nanobubbles. *Science*, 329:5991 544–547, 2010.
- [10] Hui Pan and Bin Chen. Ultra-flexibility and unusual electronic, magnetic and chemical properties of waved graphenes and nanoribbons. *Scientific Reports*, 4:4198, 2013.
- [11] Gordon E. Moore. Cramming more components onto integrated circuits. *Electronics*, 38(8), April 19 1965.
- [12] Pat Gelsinger. From petaflops to milliwatts, 2008. Intel Developer Forum.
- [13] L. Esaki and R. Tsu. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors. *IBM J. Res. Develop.*, 14:61, 1970.

- [14] K. K. Likharev. Single-electron devices and their applications. *Proc. IEEE*, 87(4):606–632, 1999. and references therein.
- [15] <http://graphene-flagship.eu>.
- [16] Gernot Schaller et al. Low-dimensional detector model for full counting statistics: Trajectories, back action, and fidelity. *Phys. Rev. B*, 81:205305, 2010.
- [17] S. Kurth et al. Dynamical coulomb blockade and the derivative discontinuity of time-dependent density functional theory. *Phys. Rev. Lett.*, 104:236801, 2010.
- [18] Massimiliano Esposito et al. Three detailed fluctuation theorems. *Phys. Rev. Lett.*, 104:090601, 2010.
- [19] Gregory Bulnes et al. Fluctuation theorems for capacitively coupled electronic currents. *Phys. Rev. B*, 84:165114, 2011.
- [20] Eli Wilner et al. Bistability in a nonequilibrium quantum system with electron-phonon interactions. *Phys. Rev. B*, 88:045137, 2013.
- [21] Gernot Schaller et al. Counting statistics in multistable systems. *Phys. Rev. B*, 81:205305, 2010.
- [22] C. Fricke et al. Bimodal counting statistics in single-electron tunneling through a quantum dot. *Phys. Rev. B*, 76:155307, 2007.
- [23] Tobias Kramer et al. Wave packet approach to transport in mesoscopic systems. *Phys. Scr.*, 82:038101, 2010.
- [24] Shuanglong Liu et al. Electronic and transport properties of molecular junctions under a finite bias: A dual mean field approach. *J. Chem. Phys.*, 139:191103, 2013.
- [25] Peter Schmitteckert et al. Exact ground state density-functional theory for impurity models coupled to external reservoirs and transport calculations. *Phys. Rev. Lett.*, 100:086401, 2008.
- [26] Max Koentopp et al. Density functional calculations of nanoscale conductance. *J. Phys.: Condens. Matter*, 20:083203, 2008.
- [27] Kieron Burke et al. Time-dependent density functional theory: Past, present, and future. *J. Chem. Phys.*, 123:062206, 2005.
- [28] Severin G. Jakobs et al. Nonequilibrium functional renormalization group for interacting quantum systems. *Phys. Rev. Lett.*, 99:150603, 2007.
- [29] Steven R. White et al. Real-time evolution using the density matrix renormalization group. *Phys. Rev. Lett.*, 93:076401, 2004.

- [30] S. Weiss et al. Iterative real-time path integral approach to nonequilibrium quantum transport. *Phys. Rev. Lett*, 77:195316, 2008.
- [31] J Eckel et al. Comparative study of theoretical methods for non-equilibrium quantum transport. *New J. Phys.*, 12:043042, 2010.
- [32] Samuel Colin et al. Quantum non-equilibrium and relaxation to equilibrium for a class of de brogliebohm-type theories. *New J. Phys.*, 12:043008, 2010.
- [33] P. R. Holland. *The Quantum Theory of Motion: An Account of the de Broglie-Bohm Causal Interpretation of Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [34] A. Valentini et al. Dynamical origin of quantum probabilities. *Proc. R. Soc. A*, 461:253 272, 2005.
- [35] Samuel Colin. Relaxation to quantum equilibrium for dirac fermions in the de broglie-bohm pilot-wave theory. *PProc. R. Soc. A*, 468:1116 1135, 2012.
- [36] Ivan Kassal et al. Polynomial-time quantum algorithm for the simulation of chemical dynamics. *PNAS*, 105:18681–18686, 2008.
- [37] A. Montina et al. Exponential complexity and ontological theories of quantum mechanics. *Phys. Rev. A*, 77:022104, 2008.
- [38] X. Oriols. Quantum trajectory approach to time dependent transport in mesoscopic systems with electron-electron interactions. *Phys. Rev. Lett*, 98:066803–066807, 2007.
- [39] et al. M. Guerra. *Física: (tomo I) Elementos fundamentales*. Editorial Reverté, S. A., Barcelona, 1994.
- [40] Skriver. *The LMTO Method*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1984.
- [41] Magyari-Kope. *Structural Stability of Solids from First Principles Theory*. PhD thesis, Royal Institute of Technology Department of Physics, Stockholm, 2002.
- [42] Rowland, Todd. "Functional." From MathWorld—A Wolfram Web Resource, created by Eric W. Weisstein. <http://mathworld.wolfram.com/Functional.html>.
- [43] Rogal. *Stability, Composition and Function of Palladium Surfaces in Oxidizing Environments*. PhD thesis, Freie Universität Berlin, Berlin, 2006.
- [44] Otiniano, Ruiz, Fernández, Mendoza, and Landauro. Estudio de la aplicabilidad de pseudopotenciales empíricos locales en el cálculo de la estructura electrónica de aluminio y silicio. *REVISTA DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UNI*, 10:33–41, 2006.

- [45] W. Kohn and L. J. Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.*, 140:A1133, 1965.
- [46] Ashcroft and Mermin. *Solid State Physics*. Thomson Learning, Inc, 1976.
- [47] R. Dingle et al. Electron mobilities in modulation-doped semiconductor heterojunction superlattices. *Appl. Phys. Lett.*, 33:665, 1978.
- [48] K. S. et al. Novoselov. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306:666 – 669, 2002.
- [49] Jeroen B. Oostinga et al. Gate-induced insulating state in bilayer graphene devices. *Nature Materials*, 7:151 – 157, 2007.
- [50] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene. *Nature Physics*, 2:620 – 625, 2006.
- [51] David K. Ferry and Stephen M. Goodnick. *Transport in Nanostructures*. Cambridge University Press, Cambridge, 2005.
- [52] Supriyo Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
- [53] Timothy Michael Coffey. *Non-dynamical quantum trajectories*. Doctor of philosophy, University of Texas at Austin, Austin, 2010.
- [54] X. Oriols and J. Mompart. *Applied Bohmian Mechanics: From Nanoscale Systems to Cosmology*. ISBN: 978-981-4316-39-2, 2011.
- [55] N.J. Russell M.D. Towler and A. Valentini. Timescales for dynamical relaxation to the Born rule. *Proc. Roy. Soc. A*, 468:990–1013, 2012.
- [56] Jian-Hao Chen et al. Defect scattering in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 102:236805, 2009.
- [57] A. K. Geim and K. S. Novoselov. The rise of graphene. *Nature Materials*, 6:183 – 191, 2007.
- [58] Cristina Gomez-Navarro et al. Electronic transport properties of individual chemically reduced graphene oxide sheets. *Nano Lett.*, 7:3499–3503, 2007.
- [59] Claire Berger et al. Ultrathin epitaxial graphite: 2d electron gas properties and a route toward graphene-based nanoelectronics. *J. Phys. Chem. B.*, 108:19912–19916, 2004.
- [60] X. Du, I. Skachko, A. Barker, and E. Y. Andrei. Approaching ballistic transport in suspended graphene. *Nature Nanotechnology*, 3:491 – 495, 2008.

- [61] K.I. Bolotin et al. Ultrahigh electron mobility in suspended graphene. *Solid State Communications*, 146:351–355, 2008.
- [62] Shaffique Adam, E. H. Hwang, V. M. Galitski, and S. Das Sarma. A self-consistent theory for graphene transport. *PNAS*, 104:18392–18397, 2007.
- [63] Xiaochen Dong et al. Symmetry breaking of graphene monolayers by molecular decoration. *Phys. Rev. Lett.*, 102:135501, 2009.
- [64] S. Y. Zhou et al. Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene. *Nature Materials*, 6:770 – 775, 2007.
- [65] Kostya Novoselov. Graphene: Mind the gap. *Nature Materials*, 6:720 – 721, 2007.
- [66] S.Y. Zhou et al. Origin of the energy bandgap in epitaxial graphene. *Nature Materials*, 7:259 – 260, 2008.
- [67] I. Brihuega et al. Quasiparticle chirality in epitaxial graphene probed at the nanometer scale. *Phys. Rev. Lett.*, 101:206802, 2008.
- [68] A. H. Castro Neto and et. al. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 81:109, 2009.
- [69] “The general theory of quantum mechanics is now almost complete. The underlying physical laws necessary for the mathematical theory of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty is only that the exact application of these laws leads to equations much too complicated to be soluble.” P.A.M. Dirac, Proceedings of the Royal Society of London, **A 123**, 714 (1929).
- [70] M. P. Nightingale et al. *Quantum Monte Carlo Methods in Physics and Chemistry*. Springer, 1999.
- [71] M. Suzuki. *Quantum Monte Carlo Methods in Condensed Matter Physics*. World Scientific, 1993.
- [72] D. R. Hartree. The wave mechanics of an atom with a non-coulomb central field. part ii. some results and discussion. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 24 (01):111, 1928.
- [73] V. Fock et al. Näherungsmethode zur lösung des quanten mechanischen mehrkörperproblems. *Z. Phys.*, 61:126, 1930.
- [74] W. Kohn. Nobel lecture: Electronic structure of matter-wave functions and density functionals. *Reviews of Modern Physics*, 71(5):1253, 1998.
- [75] P. Hohenberg et al. Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, 136:B864, 1964.

- [76] W. Kohn et al. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev. A*, 140:1163, 1965.
- [77] <http://www.gaussian.com/>.
- [78] J. M. Soler et al. The siesta method for ab initio order-n materials simulation. *J. Phys.: Condens. Matter*, 14:2745–2779, 2002.
- [79] E. Runge et al. Density-functional theory for time-dependent systems. *Phys. Rev. Lett.*, 52:997, 1984.
- [80] G. F. Giuliani et al. *Quantum Theory of electron Liquid*. Cambridge University Press, 2005.
- [81] K. Capelle et al. Density-functional theory for time-dependent systems. *Phys. Rev. Lett.*, 78(10):1872, 1997.
- [82] M. Di Ventura et al. Stochastic time-dependent current-density-functional theory. *Phys. Rev. Lett.*, 98:226403, 2007.
- [83] P. R. Holland. *The Quantum Theory of Motion*. Cambridge University Press, Cambridge, 1993.
- [84] J. S. Bell. *Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1987.
- [85] D. Dürr and S. Teufel. *Bohmian Mechanics: The Physics and Mathematics of Quantum Theory*. Springer, Germany, 2009.
- [86] X. Oriols et al. Quantum trajectory approach to time dependent transport in mesoscopic systems with electron-electron interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 98:066803–066807, 2007.
- [87] G. Albareda et al. Many-particle hamiltonian for open systems with full coulomb interaction: Application to classical and quantum time-dependent simulations of nanoscale electron devices. *Phys. Rev. B*, 79:075315–075331, 2009.
- [88] C. Cohen-Tannoudji et al. *Quantum Mechanics (Vol I and II)*. Wiley, John and Sons, 1978.
- [89] Existe una ambigüedad en la definición de la densidad de corriente que satisface la 2.3. Otra densidad de corriente con un período de divergencia libre añadido también satisfará la misma ecuación de continuidad. Holanda [115] considerado el requisito de la invariancia de Lorentz y encontró una corriente única para la teoría de Dirac de una partícula. Si se toma el límite no relativista de este corriente uno encuentra la contribución de un espín extra, sumandose a la velocidad de Bohm en la 2.9. Esta ambigüedad no aparece en la predicción estadística de los resultados observables, por

lo que se utiliza el equilibrio cuántico. Por lo tanto, esta discusión es irrelevante para este trabajo, donde las trayectorias Bohmianas sólo se utilizan como herramientas computacionales para reproducir los resultados observables.

- [90] D. Dürr et al. Quantum equilibrium and the role of operators as observables in quantum theory. *Journal of Statistical Physics*, 116:9595, 2004.
- [91] X.Oriols. Implications of the non-crossing property of bohm trajectories in one-dimensional tunneling configurations. *Physical Review A*, 54 (4):2595, 1996.
- [92] et al. Harvey R Brown. Remarks on identical particles in de broglie-bohm theory. *Physics Letters A*, 251(4):229–235, 1999.
- [93] For example, the permutation $\vec{p}(l) = \{3, 2, 1\}$ on the conditional wave function used to compute the trajectory $\vec{r}_1[t]$ has the initial wave packet $\psi_3(\vec{r}_1, t)$ because $p(l)_3 = 1$.
- [94] X.Oriols et al. Non-universal conductance quantization for long quantum wires: the role of the exchange interaction. *Nanotechnology*, 15:S167–S175, 2004.
- [95] A. Alarcón et al. Towards the explicit computation of bohm velocities associated to n-electron wavefunctions with arbitrary spin-orientations. *Physica Status Solidi C*, 7:11, 2010.
- [96] X. Oriols et al. An electron injection model for time-dependent simulators of nanoscale devices with electron confinement: Application to the comparison of the intrinsic noise of 3d-, 2d- and 1d-ballistic transistors. *Solid-State Electronics*, 51:306–319, 2007.
- [97] <http://europe.uab.es/bitlles>.
- [98] Vadim V. Cheianov and Vladimir I. Fal’ko. Selective transmission of dirac electrons and ballistic magnetoresistance of n-p junctions in graphene. *Phys. Rev. B*, 74:041403(R), 2006.
- [99] Igor A. Luk’yanchuk and Alexander M. Bratkovsky. Lattice-induced double-valley degeneracy lifting in graphene by a magnetic field. *Phys. Rev. Lett.*, 100:176404, 2008.
- [100] Eun-Ah Kim et al. Graphene as an electronic membrane. *EPL*, 84:57007, 2008.
- [101] Marco Gibertini et al. Electron density distribution and screening in rippled graphene sheets. *Phys. Rev. B*, 81:125437, 2010.
- [102] Warren E. Pickett. Pseudopotential methods in condensed matter applications. *Computer Physics Reports*, 9:115–197, 1989.
- [103] John P. Perdew et al. Generalized gradient approximation for the exchange-correlation hole of a many-electron system. *Phys. Rev. B*, 54:16533, 1996.

-
- [104] Hendrik J. Monkhorst et al. Special points for brillouin-zone integrations. *Phys. Rev. B*, 13:5188, 1976.
- [105] K. Stokbro et al. Transiesta: A spice for molecular electronics. *Annals of the New York Academy of Sciences*, 1006:212226, 2003.
- [106] M. Sprinkle et al. Scalable templated growth of graphene nanoribbons on sic. *Nature Nanotechnology*, 5:727–731, 2010.
- [107] Ke-Ke Bai et al. Creating one-dimensional nanoscale periodic ripples in a continuous mosaic graphene monolayer. *arXiv:1404.4407*, 2014.
- [108] et al. Kwanpyo Kim. Multiply folded graphene. *Phys. Rev. B*, 83:245433, 2011.
- [109] et al. Yeh. Nano-scale strain-induced giant pseudo-magnetic fields and charging effects in cvd-grown graphene on copper. *ECS Transactions*, 35:(3), 2011.
- [110] M. M. Fogler et al. Pseudomagnetic fields and ballistic transport in a suspended graphene sheet. *Phys. Rev. Lett.*, 101:226804, 2008.
- [111] et al. Lan Meng. Strain-induced one-dimensional landau level quantization in corrugated graphene. *Phys. Rev. B*, 87:205405, 2013.
- [112] F. Guinea et al. Midgap states and charge inhomogeneities in corrugated graphene. *Phys. Rev. B*, 77:075422, 2008.
- [113] A.S. Barnard et al. Ripple induced changes in the wavefunction of graphene: an example of a fundamental symmetry breaking. *Nanoscale*, 21:1167–70, 2012.
- [114] Muneer Ahmad et al. Local conductance measurement of graphene layer using conductive atomic force microscopy. *J. Appl. Phys.*, 110:054307, 2011.
- [115] P.R.Holland and C. Philippidis. Implications of lorentz covariance for the guidance equation in two-slit quantum interference. *Physical Review A*, 67:062105, 2003.