



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

# TRANSPORTE ELÉCTRICO EN UNA NANOESTRUCTURA GRAFENO - SUPERCONDUCTOR

MAURICIO FABIÁN DUQUE DAZA

Universidad Nacional de Colombia  
Facultad de Ciencias, Departamento de Física  
Bogotá D. C., Colombia  
2011



# TRANSPORTE ELÉCTRICO EN UNA NANOESTRUCTURA GRAFENO - SUPERCONDUCTOR

MAURICIO FABIÁN DUQUE DAZA

Trabajo de grado presentado como requisito parcial para optar al título en Magister en Ciencias - Física

Director: Doctor William Javier Herrera

Línea de Investigación:  
Materia Condensada Teórica, Superconductividad Teórica  
Grupo de Investigación:  
Nanotecnología y Superconductividad

Universidad Nacional de Colombia  
Facultad de Ciencias, Departamento de Física  
Bogotá D. C., Colombia

© 2011



A las reinas que amo, Shirley mi  
hermosa esposa, mi compañera por la  
eternidad que siempre me comprende y  
Valentina mi adorable hija, mi  
pechuguita preciosa, cuya educación  
marca un gran reto

A la naturaleza  
y a las personas que siempre creyeron en mí

A la vida por darme una nueva oportunidad para hacer lo que me gusta





UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

SEDE BOGOTÁ  
FACULTAD DE CIENCIAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
DIRECCIÓN ÁREA CURRICULAR DE FÍSICA

ACTA DE SUSTENTACIÓN – POSTGRADO

No. 017

Los abajo firmantes nombrados por el Consejo de Facultad de Ciencias, en su sesión del día 15 de septiembre de 2011, según, Acta No. 33, como JURADO CALIFICADOR de la Tesis de Maestría en Ciencias Física titulada: **Transporte eléctrico en una nanoestructura grafeno – superconductor**, realizada por el estudiante:

CODIGO	D. DE IDENTIFICACIÓN	NOMBRE Y APELLIDOS
835060	80037939	MAURICIO FABIAN DUQUE DAZA

Y dirigido por el **Dr. WILLIAM JAVIER HERRERA** Profesor del Departamento de Física (Universidad Nacional de Colombia) con cédula de ciudadanía número 79643824, luego de la sesión de sustentación oral realizada el día 28 de Septiembre de 2011, a las 11:00 a.m., en el salón 217 Edificio 405 Universidad Nacional de Colombia, con la coordinación del profesor **JAIRO ALEXIS RODRÍGUEZ** Delegado de la Dirección del Área Curricular de Física, hemos decidido otorgar a la Tesis de Maestría la calificación de:

APROBADO:  REPROBADO:

Se solicita MENCIÓN: LAUREADA  MERITORIA  NINGUNA

OBSERVACIONES: *Se felicita al estudiante por un trabajo destacado.*

**DR. JUAN CARLOS GRANADA**  
Departamento de Física  
Universidad del Valle  
C.C. 10111822  
Jurado

**DR. DAVID ARSENIÓ LANDINEZ TELLEZ**  
Departamento de Física  
Universidad Nacional de Colombia  
C.C. 91245162  
Jurado

**DR. RAFAEL RAMÓN REY GONZÁLEZ**  
Departamento de Física  
Universidad Nacional de Colombia  
C.C. 19441690  
Jurado

**DR. JAIRO ALEXIS RODRÍGUEZ LÓPEZ**  
Departamento de Física  
Universidad Nacional de Colombia  
C.C. 79466051  
Delegado de la Dirección Curricular de Física

**NOTA:**  
➤ La motivación de la mención debe llegar a la Secretaría de Facultad dentro de los quince (15) días calendario siguientes a la fecha de la sustentación. Si el Jurado desea dejar alguna constancia, se puede utilizar al respaldo de esta hoja. Si la calificación es REPROBADA el jurado debe motivarla.  
➤ Es requisito el número de cédula y nombre de la Facultad o Institución a la que pertenece el director del Trabajo de Grado.  
➤ Este formato debe estar completamente diligenciado y con las firmas correspondientes para su validez.

ciencia, tecnología e innovación para el país





## **AGRADECIMIENTOS**

*Deseo agradecer primeramente a la vida, a Dios y a todas las personas que de un modo u otro me ayudaron en la realización de este trabajo*

- *A mi esposa por su compañía, ayuda, su gran apoyo y sobre todo por su fe en mí, te amo Shirley y estoy feliz de poder compartir esto contigo.*
- *A mi hija por ser tan comprensiva y tan buena hija, te amo Valentina.*
- *A mi Abuelita Concha por su constante soporte.*
- *Al Profesor William, que me dio la oportunidad de trabajar en este tema y fue muy paciente conmigo, gracias por su ayuda y su confianza en mí aún cuando yo no veía la luz.*
- *A los proyectos financiados por la DIB que permitieron el desarrollo de este trabajo.*
- *A la facultad de Ciencias, por su programa de Becas, que fueron un gran beneficio en duros momentos.*
- *A mi Herma gracias por todos tus comentarios, consejos, ayuda, que te extraño y gracias por todos los artículos que me facilito así estés ocupado con mil cosas.*
- *Al Profesor C. W. J. Beenakker por responderme la duda sobre su artículo.*
- *A los forums de L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X, Gnuplot, MathCad por sus discusiones y sugerencias.*
- *A mi amigo Leo, gracias por sus palabras de aliento y por enseñarme a preguntarme, así cueste más tiempo.*
- *A mis compañeros y grandes amigos, Andrea, Carlos, Nancy, Robin, Mauro, Karem y Hector Mauricio con los cuales compartí ese primer camino en el estudio de la naturaleza, y me mostraron puntos de vista diferentes, gracias amigos desde la distancia.*
- *Grazie alla signora Zorio per il suo appoggio per la educazione di Valentina. Grazie Signora Maria Teresa e Signora Elvira per tutti i consigli e gli aiuti.*
- *A Gloria Esperanza, ya que su ayuda permitió que los procesos administrativos no fueran tan tortuosos.*
- *A la señora Isabel porque siempre nos ayuda y colabora, Suegra Gracias.*



# RESUMEN

Se realizó un estudio de la conductancia diferencial, en una juntura grafeno - superconductor (**GS**) y grafeno - aislante - superconductor (**GIS**) en donde se puede presentar borde *Zigzag* o *Armchair*. El análisis se realizó en términos de las ecuaciones de Bogoliubov - de Gennes - Dirac, donde el superconductor es isotrópico, y el aislante entre la región del grafeno y el superconductor es tipo delta Dirac. Se determinó que las reflexiones de *Andreev* dependen del dopaje de grafeno, para dopajes menores o iguales al potencial de pares son nulas cuando la energía de excitación es igual al dopaje. Este efecto se manifiesta en la conductancia diferencial, la cual es nula al mismo valor de energía de excitación e independiente del tipo de borde. Para una juntura **GIS** con borde *Zigzag*, se manifiesta que el efecto del aislante es nulo para todo dopaje del grafeno menor o igual al potencial de pares, y para dopajes mayores se determina que el efecto del aislante es periódico. Para una juntura **GIS** con borde *Armchair*, el efecto del aislante es aumentar las reflexiones de electrón en el segundo valle de manera que la conductancia disminuye, independiente del valor de dopaje.

**Palabras clave:** Grafeno, Superconductividad, Conductancia Diferencial, Frontera *Zigzag*, Frontera *Armchair*.

## Abstract

We study differential conductance at graphene - superconductor junction (**GS**) and graphene - insulator - superconductor junction (**GIS**) with Zigzag edge or Armchair edge. The analysis was carried out in terms of the equations of Bogoliubov - de Gennes - Dirac, where the superconductivity is isotropic, and an insulator between the region of the graphene and the superconductor is type Dirac delta. It was determined that the reflections of *Andreev* are dependent of graphene doping, becoming zero when the excitation energy is equal to the doping for doping less than the order parameter. This effect is manifested in the differential conductance, which is zero at the same excitation energy value independent of the type of edge. At a **GIS** junction with *Zigzag* edge, it appears that the insulator effect is zero for all doping of graphene less than the order parameter. For doping higher than order parameter it determined that the insulator effect is periodic. For **GIS** junction with *Armchair* edge, for all doping of graphene that the insulator effect increases the electron's reflection at other valley therefore the differential conductance drops and it's independent of doping of graphene.

**Keywords:** Graphene, Superconductivity, Differential Conductance, Zigzag edge, Armchair edge.



<b>AGRADECIMIENTOS</b>	<b>IX</b>
<b>RESUMEN</b>	<b>XI</b>
<b>MOTIVACIÓN</b>	<b>XV</b>
<b>INTRODUCCIÓN</b>	<b>1</b>
<b>1. El Grafeno</b>	<b>5</b>
1.1. Estructura . . . . .	5
1.2. Espectro de Energía . . . . .	6
1.3. Tipos de Frontera . . . . .	8
1.3.1. Condición de Frontera <i>Armchair</i> . . . . .	10
1.3.2. Condición de Frontera <i>Zigzag</i> . . . . .	10
1.4. Soluciones Generales de la Ecuación de Dirac en el Grafeno . . . . .	11
1.4.1. Soluciones para un Grafeno homogéneo . . . . .	11
1.4.1.1. Punto de Dirac $\mathbf{K}$ . . . . .	11
1.4.1.2. Punto de Dirac $\mathbf{K}'$ . . . . .	12
1.5. Superficie semi – infinita de Grafeno . . . . .	13
1.6. <i>Tunelamiento de Klein</i> en el grafeno . . . . .	15
1.7. Discusión . . . . .	17
<b>2. Soluciones de las ecuaciones de Bogoliubov - de Gennes - Dirac</b>	<b>19</b>
2.1. Ecuaciones de Bogoliubov - de Gennes - Dirac . . . . .	19
2.1.1. Hamiltoniano . . . . .	20
2.1.2. Potencial de Pares . . . . .	20
2.1.3. Operador de Inversión Temporal . . . . .	21
2.2. Soluciones Generales de un grafeno en estado superconductor . . . . .	22
2.2.1. Ansatz para el Grafeno en estado superconductor . . . . .	22
2.2.2. Espinores en el punto de Dirac $\mathbf{K}$ . . . . .	23
2.2.3. Espinores en el punto de Dirac $\mathbf{K}'$ . . . . .	24
2.3. Reflexiones de Andreev . . . . .	25
2.4. Discusión . . . . .	27
<b>3. Reflexiones de Andreev y Propiedades de Transporte en Interfases con frontera Zigzag</b>	<b>29</b>
3.1. Interfases con Grafeno . . . . .	29

3.2. Juntura Grafeno en Estado Normal - Grafeno en Estado Superconductor . . . . .	30
3.2.1. Coeficientes de Reflexión . . . . .	31
3.2.2. Conductancia Diferencial . . . . .	33
3.3. Juntura Grafeno en Estado Normal - Aislante - Grafeno en Estado Superconductor	35
3.3.1. Coeficientes de Reflexión . . . . .	36
3.3.2. Conductancia Diferencial . . . . .	36
3.4. Discusión . . . . .	39
<b>4. Reflexiones de Andreev y Propiedades de Transporte en Interfases con frontera Armchair</b>	<b>41</b>
4.1. Interfases con Grafeno . . . . .	41
4.2. Juntura Grafeno en Estado Normal - Grafeno en Estado Superconductor . . . . .	42
4.2.1. Coeficientes de Reflexión . . . . .	43
4.2.2. Conductancia Diferencial . . . . .	45
4.3. Juntura Grafeno en Estado Normal - Aislante - Grafeno en Estado Superconductor	46
4.3.1. Coeficientes de Reflexión . . . . .	46
4.3.2. Conductancia Diferencial . . . . .	48
4.4. Discusión . . . . .	51
<b>RESUMEN Y CONCLUSIONES</b>	<b>53</b>
<b>PERSPECTIVAS</b>	<b>55</b>
<b>A. Demostración de la simetría de inversión temporal del Hamiltoniano del Grafeno</b>	<b>57</b>
<b>B. Relaciones entre los factores BCS de una cuasipartícula</b>	<b>59</b>
<b>C. Demostración de la densidad de corriente de probabilidad en una superficie de grafeno homogéneo</b>	<b>61</b>
<b>D. Soluciones de las Amplitudes de Probabilidad de una Juntura Grafeno - Aislante - Superconductor con Frontera Zig - Zag</b>	<b>63</b>
<b>E. Coeficientes de Reflexión y Conductancia Diferencial de una juntura GIS con frontera Armchair</b>	<b>65</b>
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	<b>74</b>

En el año 2004 el grupo de A. K. Geim [1] en Manchester descubrieron experimentalmente el grafeno, el cual es una estructura de grafito a temperatura ambiente cuya razón superficie / alto es muy grande, de manera que se puede asumir como un sistema bidimensional confirmando los estudios de Wallace [2, 3], los cuales predecían que en un sistema bidimensional de grafito la banda de conducción y la banda de valencia se tocan en las esquinas de la primera zona de Brillouin, y en cercanías a esos puntos el espectro de energía es lineal. Debido a que, el espectro es lineal los portadores de carga no tienen masa efectiva, de manera que se comportan como partículas sin masa en reposo en cercanías a los puntos donde la banda de conducción y la banda de valencia se tocan. De manera que, los portadores de carga se desplazan cientos de distancias interatómicas sin dispersarse a temperatura ambiente [4, 5] i.e., este sistema se comportan como un semiconductor sin gap que cumple con una ecuación tipo ecuación de Dirac. Con la obtención del grafeno Botswick *et al.* [6] confirmaron experimentalmente las predicciones teóricas de Wallace, donde hay un gap nulo entre la banda de valencia y la banda de conducción. Adicionalmente se determino que se puede cambiar el nivel de Fermi del grafeno por un dopaje o potencial externo de tal manera que se pueden incluir electrones a la banda de conducción o huecos a la banda de valencia.

Posteriormente a su obtención, siguieron algunos trabajos teóricos sobre las propiedades de transporte que involucran interfases con grafeno, entre ellos, el estudio de Katsnelson *et al.* [7] determina que en una interfase **GIG** el efecto de un aislante es nulo sobre las propiedades de transporte para ciertos ángulos de incidencia de los portadores de carga. Por otro lado, se realizaron algunos trabajos sobre las propiedades de transporte que involucran interfases entre grafeno y regiones superconductoras cuando se presenta borde *Zigzag* entre ellos, el estudio de la conductancia diferencial en una juntura grafeno en estado normal - grafeno en estado superconductor [8] en el cual se analiza el efecto del dopaje del grafeno en estado normal, determinando que a bajos dopajes se pueden presentar reflexiones de *Andreev* especulares y la conductancia diferencial es nula para una energía de excitación igual al dopaje. Otro estudio de la conductancia diferencial es cuando hay un aislante entre un grafeno fuertemente dopado y un superconductor [9, 10]. En este caso se analiza el efecto del ancho de la barrera de potencial que representa el aislante (**I**), determinando que en el límite de un aislante tipo delta de Dirac el efecto del mismo sobre la conductancia diferencial es periódico y la conductancia presenta un valor mínimo. Adicionalmente a los trabajos teóricos en el año 2007 Heersche midió la corriente Josephson [11] en una juntura **SGS**, donde al grafeno superconductor se le había inducido superconductividad por efecto proximidad desde un superconductor de baja temperatura crítica.

Por lo tanto, como no se ha reportado ningún estudio en las propiedades de transporte en una juntura grafeno en estado normal - aislante - grafeno en estado superconductor, cuando se tiene

en cuenta diferentes valores de dopaje y se observa el efecto de los tipos de borde *Zigzag* o *Armchair*, y por sus variadas y sorprendentes propiedades es relevante estudiar las propiedades eléctricas de un nanocontacto de una nanocinta de grafeno con un superconductor con diferentes condiciones de frontera.



# INTRODUCCIÓN

El grafeno consiste de una monocapa de átomos de carbono formando una red de Bravais hexagonal con una base de dos átomos de carbono; aunque este material fue estudiado teóricamente por Wallace en 1947 [2, 3], solamente fue posible aislarlo experimentalmente hasta el 2004 por el grupo de A. K. Geim [1] en Manchester, a quienes en el año 2010 se les otorgó el Premio Nobel de Física por su trabajo en el desarrollo de técnicas experimentales novedosas para la obtención del grafeno y la potencialidad de este material en aplicaciones tecnológicas [12].

Los estudios realizados por R. P. Wallace determinaron que la banda de valencia y la banda de conducción del grafeno se tocan únicamente en los seis vértices de la primera zona de Brillouin (BZ), y puede ser visto como un semiconductor de gap cero. Adicionalmente, alrededor de estos puntos de la red hexagonal la estructura de bandas del grafeno es lineal a bajas energías, análogo al de partículas relativistas de masa en reposo cero, con lo que la dinámica puede ser simulada con la ecuación de Dirac, donde la velocidad de grupo de los portadores es del orden de  $10^6$  m/s [13].

Las características del espectro de energía del grafeno motivaron a que este material fuera estudiado intensivamente desde su obtención, corroborando su estructura de bandas [1, 6, 12, 14–16]. Por ejemplo, se ha encontrado el efecto Hall cuántico anómalo<sup>1</sup>[12, 14, 17] que es característico de partículas ultrarelativistas. También se ha estudiado el tunelamiento en barreras y pozos de potencial en juntas basadas en grafeno [9, 10, 18], ya que este material al poseer un espectro de energía lineal y tener un grado de libertad adicional que se toma como un pseudospín, se convierte en un candidato para poner a prueba predicciones relacionadas con la denominada paradoja de Klein [7, 19–21].

Aunque el grafeno no es superconductor, se le puede inducir la superconductividad al colocarse sobre un material superconductor debido al efecto de proximidad [11, 22]. Se ha observado experimentalmente el efecto Josephson en juntas **SGS** (S: superconductor y G: grafeno) [11], donde el efecto de coherencia entre las dos regiones superconductoras es establecido por el transporte eléctrico a través del grafeno. Esto ha abierto un campo reciente de investigación teórico y experimental en interfases **GS**. [8–10, 23–25].

Cuando se tienen interfases entre un material en el estado normal y un superconductor, se presentan reflexiones de Andreev, donde un electrón incidente desde la región normal es reflejado como un hueco y un par de Cooper es transmitido a la región superconductor. Estas reflexiones de Andreev estudiadas antes de la aparición del grafeno mostraban que el electrón y el hueco reflejado por la interfase pertenecen a la misma banda de energía, de tal manera que el hueco

---

<sup>1</sup>Este efecto se predice en un gas *bidimensional* de partículas ultrarelativistas en presencia de un campo magnético.

reflejado tiene una velocidad de grupo en la dirección opuesta al electrón incidente, es decir es retroreflejado. En una interfase **GS**, puede ocurrir que el hueco reflejado esté localizado en la banda de valencia del grafeno, el cual posee una velocidad de grupo que es paralela a su momentum, ocasionando que el hueco se refleje especularmente (una reflexión de Andreev especular). Estas reflexiones fueron explicadas por Beenakker en el caso de interfaces **GS** [8, 21] y se han empleado para estudiar otros tipos de juntas [26, 27], debido a su importancia en las propiedades de transporte eléctrico.

De los seis vértices de la zona de Brillouin solo dos son inequivalentes<sup>2</sup>,  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$ , y se suelen denominar como puntos de Dirac; dependiendo del tipo de fronteras, las soluciones alrededor de cada punto de Dirac pueden ser combinadas o no. Por ejemplo, estudios de nanocintas formadas con grafeno han determinado que el sistema puede presentar un comportamiento conductor o aislante dependiendo del número de celdas existentes dentro de la cinta. Esto se presenta para condiciones de frontera denominadas *Armchair*. En el caso de fronteras *Zigzag*, el comportamiento es conductor y aparecen estados de energía superficial alrededor de energía cero [28]. En los trabajos mencionado sobre juntas **GS** y **SGS**, se consideran los dos valles del espectro de energía desacoplados, lo que equivale a condiciones de frontera *Zigzag* en las interfaces [9, 10, 23]. En este trabajo se analiza el efecto de considerar el efecto de fronteras *Armchair* o *Zigzag*.

Es de nuestro interés estudiar el efecto de las diferentes reflexiones de Andreev sobre el transporte eléctrico en interfaces **GS** cuando se consideran condiciones de frontera *Armchair* o *Zigzag*, lo cual no se ha realizado. Adicionalmente, teniendo en cuenta que la transparencia perfecta de las interfaces puede ser difícil de conseguir experimentalmente, por lo tanto también se estudia una junta **GIS** (I: aislante) y se encuentra el comportamiento de las reflexiones de Andreev y la conductancia diferencial en estos sistemas para las condiciones de fronteras consideradas.

Este trabajo se ha dividido en cinco capítulos. En el primer capítulo se realiza una revisión de los aspectos relevantes del grafeno y se encuentran las soluciones generales para los portadores de carga en el grafeno a partir de la ecuación de Dirac. En el segundo capítulo se estudia el grafeno al cual se le ha inducido superconductividad, por lo que se presentan las ecuaciones de Bogoliubov - De Gennes - Dirac (BdGD) que describen el comportamiento de las excitaciones del sistema, y se encuentran las soluciones linealmente independientes cuando se consideran fronteras *Zigzag* y *Armchair*.

En el tercer y cuarto capítulo se estudia la interfase **GS** y **GIS** cuando se considera la condición de frontera *Zigzag* y *Armchair* respectivamente. Para la frontera *Zigzag* se modela el aislante como una barrera de ancho finito y para la frontera *Armchair* como una delta de Dirac. Se analiza el comportamiento de los coeficientes de reflexión y su efecto sobre la conductancia diferencial para cada interfase, considerando altos y bajos dopajes del grafeno.

En el último capítulo se presentan las conclusiones y las perspectivas del trabajo. En los primeros cuatro apéndices se aclaran algunos aspectos relevantes de los cálculos desarrollados y en el último apéndice se presentan resultados que son complementarios a los presentados en el cuarto capítulo. El formato de la citación de las fuentes utilizadas y la abreviación de las revistas, se basa en las disposiciones de la *American Physics Society*, es decir, la bibliografía se ordenó según el orden de citación, y en el caso de referencias de artículos el número en negrilla corresponde al volumen de la revista, además que la referencia es el respectivo DOI para un fácil acceso a los

---

<sup>2</sup>Debido a que en estos puntos la dinámica de los portadores de carga se puede simular por la ecuación de Dirac, los puntos inequivalentes también son llamados como puntos de Dirac.

artículos online. En la citación de referencias electrónicas se debe anotar que tanto la dirección electrónica como el contenido al cual se hace referencia, fue accesible durante el desarrollo del trabajo (2009 – 2011), por lo tanto como el contenido y su dirección pueden ser actualizadas y/o modificadas sin previo aviso, se recomienda tener precaución al consultar dichas referencias.



En el año 2004 el grupo dirigido por A. K. Geim [1] pudo aislar una monocapa de grafito (lo que se denomina grafeno) observando un gap nulo entre la banda de valencia y la banda de conducción. Posteriormente mediciones con ARPES (*Angle Resolved Photoemission Spectroscopy*) [6, 15], y experimentos de espectroscópica Ramman [29] han mostrado que la dinámica de los portadores de carga en el grafeno a bajas energías de excitación cumplen una dispersión lineal, confirmando los estudios realizados por Wallace 60 años antes [2, 3] sobre el espectro de energía del grafeno y presentando fenómenos que antes se creían exclusivos para sistema relativistas como efecto Hall Cuántico [12, 30]. Estudios teóricos acerca de materiales con base en grafito han demostrado la importancia de las fronteras entre interfases [31, 32] y en el caso del grafeno los estudios de Brey [28] demostraron que nanocintas de grafeno puede ser aislante o semi-metálico dependiendo del tipo de frontera y del tamaño. La obtención del grafeno, el comportamiento particular del espectro de energía de sus portadores de carga, así como el efecto de sus fronteras sobre dicho espectro ha aumentado el interés teórico y experimental de estudiar las propiedades de transporte en este material. En el presente capítulo se presentan las bases para describir el comportamiento de los portadores de carga en el grafeno a partir de solucionar la ecuación de Dirac y discutimos el efecto de fronteras *Armchair* y *Zigzag*.

## 1.1. Estructura

El grafeno es el nombre dado a una lamina bidimensional de átomos de carbono cuya estructura es hexagonal. Esta estructura puede ser vista como la superposición de dos subredes triangulares, cada una generada por los átomos  $A$  y  $B$ , [21, 31, 33, 34] como se ilustra en la Fig. 1.1.

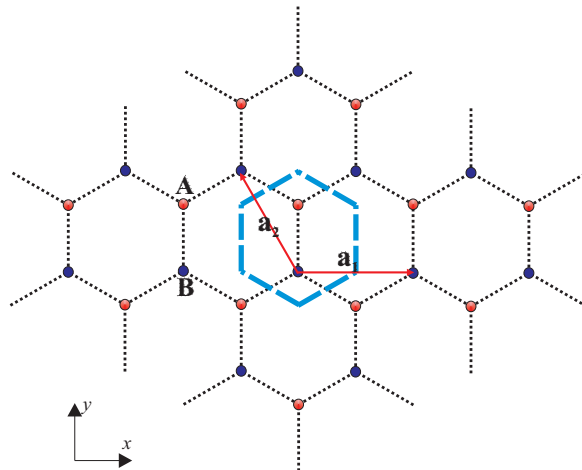


Fig. 1.1. Estructura del grafeno en el espacio real. La celda en color azul corresponde a la celda primitiva generada a partir de los vectores  $\mathbf{a}_1$  y  $\mathbf{a}_2$ .

Se observa que la celda primitiva contiene un átomo de cada subred. Los vectores primitivos de red son,

$$\mathbf{a}_1 \equiv \sqrt{2}a_0 (1, 0) \quad \text{y} \quad \mathbf{a}_2 \equiv \frac{\sqrt{2}a_0}{2} (-1, \sqrt{3}), \quad (1.1)$$

donde  $a_0 \equiv 0,142 \text{ nm}$  es la distancia entre átomos de carbono. Con base en los vectores primitivos de red (1.1) se determinan los vectores de la red recíproca (ver Fig. 1.2) como,

$$\mathbf{g}_1 \equiv \frac{\sqrt{2}\pi}{a_0} \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \quad \text{y} \quad \mathbf{g}_2 \equiv \frac{\sqrt{2}\pi}{a_0} \left(0, \frac{2}{\sqrt{3}}\right), \quad (1.2)$$

Esta red es hexagonal y los vertices en la primera Zona de Brillouin (ZB) son dados por seis vectores, de los cuales solo dos son inequivalentes, ya que no están relacionados por las simetrías de la red recíproca, i. e., no se puede obtener el punto  $\mathbf{K}$  a partir de simetrías de los vectores primitivos de  $\mathbf{K}'$ . La distancia de separación entre vertices de la primera zona de Brillouin a primeros vecinos es de  $\frac{2\pi}{\sqrt{3}a_0} \equiv 25,546 \text{ nm}^{-1}$ .

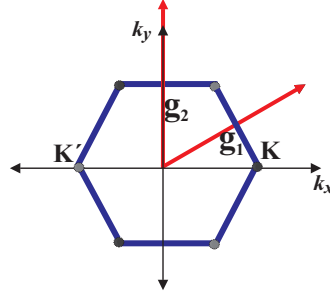


Fig. 1.2. Primera Zona de Brillouin y vectores  $\mathbf{g}_1$  y  $\mathbf{g}_2$  de la red recíproca. La diferencia de los colores de los vertices  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  indica que cada uno es generado por un conjunto diferente de vectores de la red recíproca.

Estos vectores son dados por  $\mathbf{K} = (K_D, 0) \equiv \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a_0}, 0\right)$  y  $\mathbf{K}' = (-K_D, 0) \equiv \left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}a_0}, 0\right)$  y se denominan *Puntos de Dirac*.

## 1.2. Espectro de Energía

Cálculos de bandas de energía basados en el modelo TB (*Tight-binding*) [2, 34–36] para el grafeno teniendo en cuenta únicamente interacciones entre átomos a primeros vecinos determinan una relación de dispersión de la forma

$$\begin{aligned} E^\pm(k_x, k_y) &= \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + 2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + 2 \cos[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1)]}, \\ &= \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}k_x a_0) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a_0\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_y a_0\right)}, \end{aligned} \quad (1.3)$$

donde el signo  $\pm$  hace referencia a la banda de conducción y a la banda de valencia respectivamente, y  $t \approx 2,8 \text{ eV}$  es el parámetro de acople a primeros vecinos (i.e., *hopping*). La relación de dispersión (1.3) se puede observar en la Fig. 1.3, en donde se ilustra que la banda de conducción y la banda de valencia se tocan en los puntos de Dirac y que el comportamiento del espectro cerca a estos puntos es lineal.

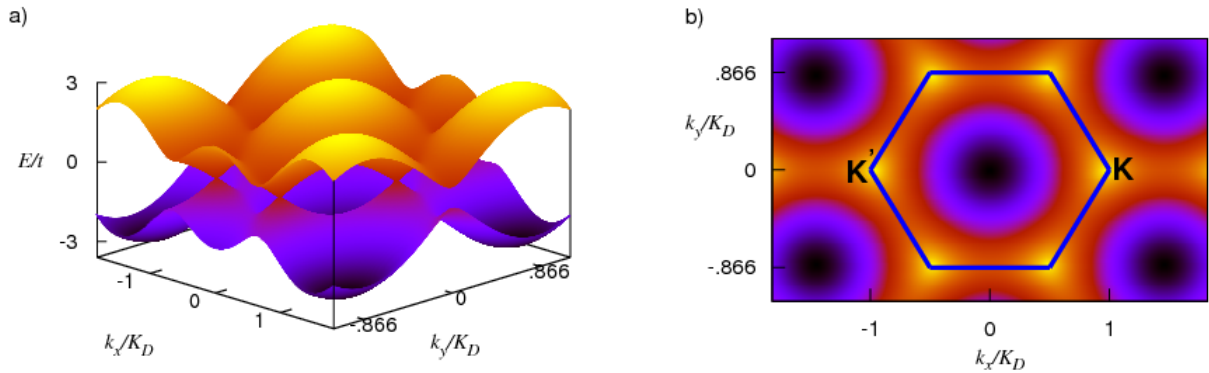


Fig. 1.3. Estructura de bandas del grafeno para  $E_F = 0$ . a) Espectro de una lamina de grafeno donde se distingue que en los vertices de la Primera Zona de Brillouin las bandas de conducción y valencia se tocan. b) Mapa de contornos del espectro de energía, donde se ve la red hexagonal en el espacio recíproco de la Fig. 1.2 y se ilustran los puntos de Dirac  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$ .

Otros estudios basados en DFT (*Density Functional Theory*) [31–33, 37] también determinan un comportamiento similar en cercanías a los puntos de Dirac  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  como se observa en la Fig. 1.4. a, en donde se ilustra la relación de dispersión a partir de cálculos de DFT y TB, y se observa que alrededor del punto  $\mathbf{K}$  la relación es lineal con los cálculos de DFT y en este rango coinciden con los cálculos de TB. La diferencia entre los dos métodos de calculo se observa en puntos alejados de  $\mathbf{K}$ , por ejemplo alrededor del punto  $\mathbf{\Gamma}$ . Esta dependencia alrededor de los puntos de Dirac se ha corroborado experimentalmente [6, 15] a partir de experimentos de ARPES como se ilustra en la Fig. 1.4. b, donde se observa el espectro de energía en la cercanía de un punto de Dirac.

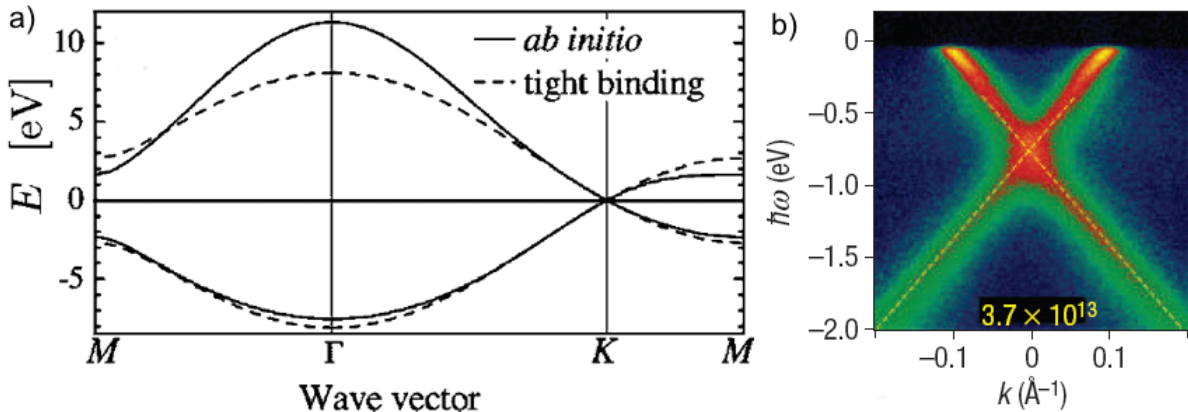


Fig. 1.4. a) Espectro de energía de una lámina de grafeno determinado por diferentes métodos. Gráfica adaptada del trabajo de Reich [36]. b) Mediciones experimentales confirmando un espectro lineal en cercanías de los puntos de Dirac para el valor de dopaje de  $3,7 \times 10^{13}$  de una lamina de grafeno por disminución de electrones por parte del sustrato. Gráfica adaptada del trabajo de Bostwick [6].

Al tener un comportamiento lineal en cercanías de los puntos de Dirac a bajas energías de excitación (i.e., masa efectiva nula) se puede aproximar la dinámica de los portadores de carga (llamados *Fermiones de Dirac*) por medio de la función envolvente  $\Psi$  que cumple con la ecuación de Dirac [2, 35] como,

$$\begin{aligned} H\Psi &= E\Psi, \\ \hbar\nu_F(\alpha \cdot \delta\mathbf{k})\Psi &= E\Psi, \end{aligned} \quad (1.4)$$

donde  $\delta\mathbf{k} [= (\delta k_x, \delta k_y) \equiv (k, q)]$  denota el vector de onda alrededor de los puntos de Dirac y  $\alpha [\equiv (\sigma_x, \sigma_y)]$  es el vector de las matrices de Pauli. Por lo tanto la relación de dispersión para desplazamientos  $\delta\mathbf{k}$  desde los puntos de Dirac  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  [8, 13, 21] es,

$$E \approx \hbar\nu_F|\delta\mathbf{k}| = \hbar\nu_F\sqrt{k^2 + q^2}, \quad (1.5)$$

con  $\nu_F (\equiv \frac{\sqrt{3}a_0}{2\hbar}t \approx 0,866 \times 10^6 \text{ m/s})$  la velocidad de Fermi.

Para el punto de Dirac  $\mathbf{K}$  la relación (1.4) es dada por

$$\begin{aligned} H_{\mathbf{K}}\Psi^{\mathbf{K}} &= E\Psi^{\mathbf{K}}, \\ -i\hbar\nu_F(\sigma_x\partial_x + \sigma_y\partial_y)\Psi^{\mathbf{K}} &= E\Psi^{\mathbf{K}}, \end{aligned} \quad (1.6)$$

con  $\Psi^{\mathbf{K}} \equiv (\psi_A^{\mathbf{K}}, \psi_B^{\mathbf{K}})$ , donde  $\psi_{A(B)}^{\mathbf{K}}$  es la componente del espinor solución de la relación (1.6) en la subred  $A(B)$  en el punto de Dirac  $\mathbf{K}$ . De forma similar la dinámica de los portadores de carga en el punto  $\mathbf{K}'$  es,

$$\begin{aligned} H_{\mathbf{K}'}\Psi^{\mathbf{K}'} &= E\Psi^{\mathbf{K}'}, \\ -i\hbar\nu_F(-\sigma_x\partial_x + \sigma_y\partial_y)\Psi^{\mathbf{K}'} &= E\Psi^{\mathbf{K}'}, \end{aligned} \quad (1.7)$$

con  $\Psi^{\mathbf{K}'} \equiv (\psi_A^{\mathbf{K}'}, \psi_B^{\mathbf{K}'})$ , donde  $\psi_{A(B)}^{\mathbf{K}'}$  es la componente del espinor solución de la relación (1.7) en la subred  $A(B)$  en el punto de Dirac  $\mathbf{K}'$ .

Dadas las funciones envolventes en cada uno de los puntos de Dirac (i.e., (1.6) y (1.7)) la función de onda total de los portadores de carga se construye como una superposición de las soluciones de (1.6) y (1.7) de la forma [28, 34, 38, 39],

$$\begin{aligned} \Phi &= \begin{pmatrix} \Phi_A \\ \Phi_B \end{pmatrix} \equiv e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}\Psi^{\mathbf{K}} + e^{i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{r}}\Psi^{\mathbf{K}'}, \\ &= e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} \psi_A^{\mathbf{K}} \\ \psi_B^{\mathbf{K}} \end{pmatrix} + e^{i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} \psi_A^{\mathbf{K}'} \\ \psi_B^{\mathbf{K}'} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.8)$$

De las soluciones de las relaciones (1.6) y (1.7) se nota que los grados de libertad asociados a las subredes  $A$  y  $B$ , son equivalentes al espín de la ecuación de Dirac y por lo tanto se suele denominar *pseudoespín*<sup>3</sup>. Las soluciones alrededor de cada punto de Dirac o valle se pueden mezclar dependiendo de las condiciones de frontera, como vamos a ver en la siguiente sección.

### 1.3. Tipos de Frontera

Debido a la estructura hexagonal del grafeno, cuando se tiene una película semi-infinita de grafeno o en contacto con otro material, el borde de la película puede ser *Zigzag* o *Armchair* [21, 33, 40]. En el caso *Zigzag* solo átomos pertenecientes a una subred (i.e.,  $A$  ó  $B$ ) están

<sup>3</sup>El espín real de los electrones no es notado explícitamente en el espectro de energía (1.3), por tal razón este espectro está degenerado respecto a este número cuántico.



en el borde, mientras en el caso *Armchair* las dos subredes (i.e., *A* y *B*) se involucran en las condiciones de frontera. Las anteriores condiciones se traducen en el espacio recíproco como combinar o no valles (i.e., en combinar o no las soluciones de los diferentes puntos de Dirac).

En la Fig. 1.5 se ilustra una película de grafeno semi - infinita en dirección  $x$  con borde *Zigzag* o *Armchair*.

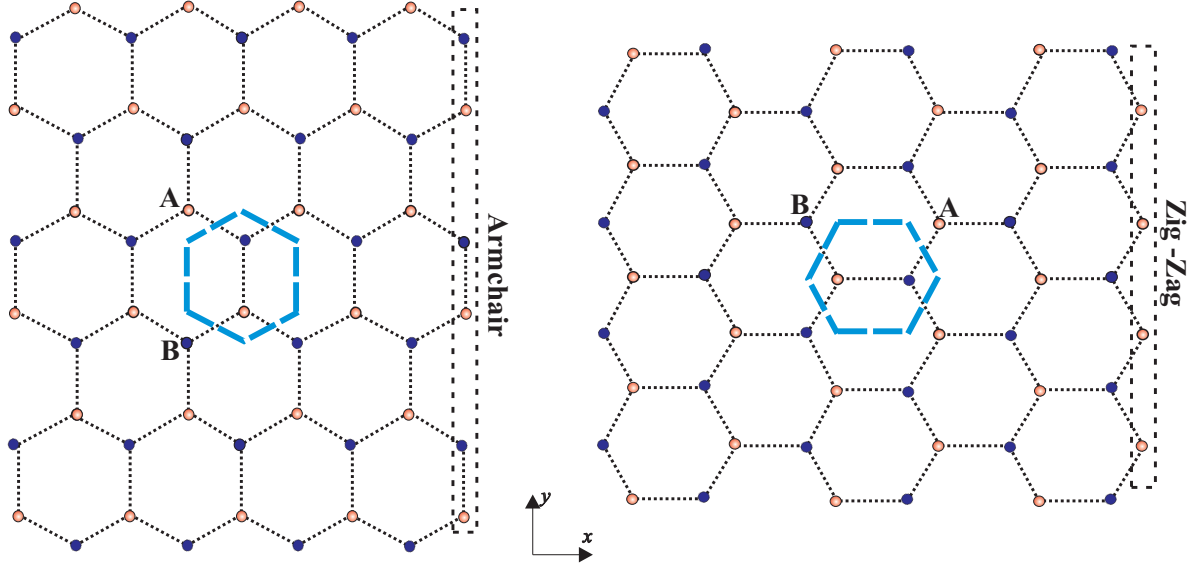


Fig. 1.5. Fronteras para una estructura de grafeno. La celda en color azul indica la celda unitaria. Los ejes permiten indicar que las condiciones de frontera *Armchair* y *Zigzag* se realizan sobre el eje  $y$ , las cuales están relacionadas entre sí por una rotación de  $90^\circ$ .

Los signos  $\pm$  de la componente  $x$  de  $\delta\mathbf{k}$  asociados los puntos de Dirac  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  en las relaciones (1.6) y (1.7), dependen del tipo de condición de frontera, ya que la ubicación del punto de Dirac  $\mathbf{K}'$  con respecto  $\mathbf{K}$  depende de la orientación de la celda unitaria. En el caso de un tipo de frontera *Armchair* la ubicación de los puntos de Dirac  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  se encuentran sobre el eje  $k$  (como se ilustra en la Fig. 1.2), en cambio en el tipo de frontera *Zigzag* los puntos de Dirac se encuentran sobre el eje  $q$ ; por tal razón, el hamiltoniano  $H_{\mathbf{K}'}$  se expresa como [39],

$$H_{\mathbf{K}'} \equiv \begin{cases} \textit{Armchair} \Rightarrow \sigma \cdot (-k, q) = -i\hbar\nu_F (-\sigma_x\partial_x + \sigma_y\partial_y), \\ \textit{Zigzag} \Rightarrow \sigma \cdot (k, -q) = -i\hbar\nu_F (\sigma_x\partial_x - \sigma_y\partial_y). \end{cases} \quad (1.9)$$

Por lo tanto la relación entre los hamiltonianos en cada punto de Dirac  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$ , para los diferentes tipos de frontera debido a la rotación de  $90^\circ$  observada en la Fig. 1.5 es,

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{\mathbf{K}}^{\textit{Armchair}} &= \mathbf{H}_{\mathbf{K}}^{\textit{Zigzag}}, \\ \mathbf{H}_{\mathbf{K}'}^{\textit{Armchair}} &= -\mathbf{H}_{\mathbf{K}'}^{\textit{Zigzag}}. \end{aligned} \quad (1.10)$$

La condición sobre la función de onda (1.8) dependiendo del tipo frontera (*Armchair* o *Zigzag*) se ilustra a continuación.

### 1.3.1. Condición de Frontera *Armchair*

Consideremos una película semi-infinita con borde *Armchair* en  $x = 0$ , para la cual exigimos sobre (1.8) que:

$$\Phi \Big|_{x=0} = \mathbf{0}, \quad (1.11)$$

es decir,

$$\left[ C_1^{Armchair} e^{iK_D x} \begin{pmatrix} \psi_A^{\mathbf{K}} \\ \psi_B^{\mathbf{K}} \end{pmatrix} + C_2^{Armchair} e^{-iK_D x} \begin{pmatrix} \psi_A^{\mathbf{K}'} \\ \psi_B^{\mathbf{K}'} \end{pmatrix} \right] \Big|_{x=0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.12)$$

donde  $C_1^{Armchair}$  y  $C_2^{Armchair}$  son los coeficientes de la superposición. La condición de frontera (1.12) genera un sistema de ecuaciones de la forma,

$$\begin{pmatrix} \psi_A^{\mathbf{K}} & \psi_A^{\mathbf{K}'} \\ \psi_B^{\mathbf{K}} & \psi_B^{\mathbf{K}'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1^{Armchair} \\ C_2^{Armchair} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.13)$$

Para que la solución del sistema de ecuaciones (1.13) no sea trivial (i.e.,  $C_1^{Armchair} \neq 0$ ;  $C_2^{Armchair} \neq 0$ ), se requiere que,

$$\left\| \begin{pmatrix} \psi_A^{\mathbf{K}} & \psi_A^{\mathbf{K}'} \\ \psi_B^{\mathbf{K}} & \psi_B^{\mathbf{K}'} \end{pmatrix} \right\| = 0, \quad (1.14)$$

es decir, los coeficientes  $C_1^{Armchair}$  y  $C_2^{Armchair}$  dependen entre si.

### 1.3.2. Condición de Frontera *Zigzag*

Considérese que se tiene una película semi-infinita en borde *Zigzag* en los átomos de la subred  $A$  en  $x = 0$ ; por lo tanto, sobre la subred  $A$  de (1.8) debemos exigir que:

$$\Phi_A \Big|_{x=0} = 0, \quad (1.15)$$

es decir,

$$\left( C_1^{Zigzag} e^{iK_D x} \psi_A^{\mathbf{K}} + C_2^{Zigzag} e^{-iK_D x} \psi_A^{\mathbf{K}'} \right) \Big|_{x=0} = 0, \quad (1.16)$$

donde  $C_1^{Zigzag}$  y  $C_2^{Zigzag}$  son los coeficientes de la superposición. La condición de frontera (1.16) genera un sistema de ecuaciones de la forma,

$$C_1^{Zigzag} \psi_A^{\mathbf{K}} + C_2^{Zigzag} \psi_A^{\mathbf{K}'} = 0. \quad (1.17)$$

Para que la solución del sistema de ecuaciones (1.17) no sea trivial, las funciones de onda provenientes de la subred  $A$  deben cumplir una de las siguientes condiciones:

$$C_2^{Zigzag} = 0 \quad \text{y} \quad \psi_A^{\mathbf{K}} = 0, \quad (1.18a)$$

$$C_1^{Zigzag} = 0 \quad \text{y} \quad \psi_A^{\mathbf{K}'} = 0. \quad (1.18b)$$

De las relaciones (1.18) se observa que existen dos soluciones independientes, es decir, la solución en el punto de Dirac  $\mathbf{K}'$  no depende de la solución en el punto de Dirac  $\mathbf{K}$ , y por lo tanto las funciones de onda provenientes de cada punto de Dirac ó valle (i.e., la solución de las relaciones (1.6) y (1.7)) para la subred  $A$  no se deben mezclar, a diferencia de la condición de frontera *Armchair* (1.12). Las soluciones en general de una lamina de grafeno para cada tipo de frontera se discutirá en la siguiente sección.

## 1.4. Soluciones Generales de la Ecuación de Dirac en el Grafeno

Se resuelven las ecuaciones de Dirac (1.6) y (1.7) con el propósito de encontrar las soluciones generales que nos permitirán más adelante resolver sistemas inhomogéneos, tales como un sistema semi – infinito o interfases.

### 1.4.1. Soluciones para un Grafeno homogéneo

Para solucionar la ecuación de Dirac en el caso de un grafeno homogéneo, consideramos el siguiente ansatz para las funciones de onda en cada uno de los puntos de Dirac  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$ ,

$$\Psi^{\mathbf{K}} \equiv \begin{pmatrix} \psi_A^{\mathbf{K}} \\ \psi_B^{\mathbf{K}} \end{pmatrix} \equiv e^{iqy} e^{ikx} \begin{pmatrix} u_A \\ u_B \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \Psi^{\mathbf{K}'} \equiv \begin{pmatrix} \psi_A^{\mathbf{K}'} \\ \psi_B^{\mathbf{K}'} \end{pmatrix} \equiv e^{iqy} e^{ik'x} \begin{pmatrix} u'_A \\ u'_B \end{pmatrix}, \quad (1.19)$$

con  $u_{A(B)}$  y  $u'_{A(B)}$  constantes que modulan las funciones de ondas planas propuestas en (1.19) y que dependen del punto de Dirac  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$ . En la relación (1.19) se especifica que el conjunto de componentes del espinor que modula (al lado derecho de las relaciones (1.19)) se encuentra directamente relacionado con los correspondientes valores propios de las ecuaciones (1.6) y (1.7).

#### 1.4.1.1. Punto de Dirac $\mathbf{K}$

Debido a que el hamiltoniano de Dirac (1.4) en el punto  $\mathbf{K}$  es independiente del tipo de frontera (1.10), y con base en el ansatz (1.19) se encuentra que la condición para que el hamiltoniano de Dirac (1.4) no tenga solución trivial es,

$$\left\| \begin{pmatrix} -\frac{E}{\hbar\nu_F} & k - iq \\ k + iq & -\frac{E}{\hbar\nu_F} \end{pmatrix} \right\| = 0, \quad (1.20)$$

de donde obtenemos el espectro de energía,

$$E = \pm \hbar\nu_F \sqrt{k^2 + q^2} \quad (1.21)$$

el cual está ilustrado en la Fig. 1.6.

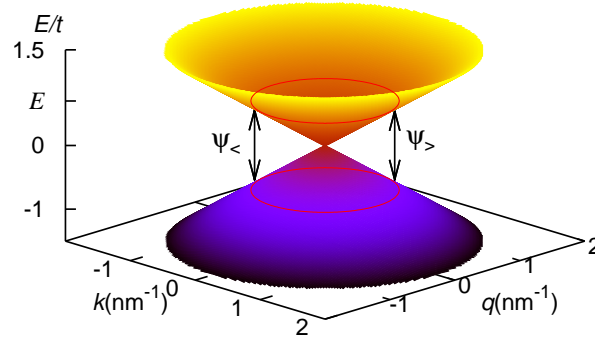


Fig. 1.6. Espectro de energía en cercanías del punto de Dirac  $\mathbf{K}$  con  $E_F = 0$ . La banda de conducción se distingue por color amarillo, mientras la banda de valencia es de color violeta. Se nota que a un mismo valor de energía  $E$  y componente  $y$  del vector de onda (i.e.,  $q$ ) existen dos espinores linealmente independientes.

En la Fig. 1.6 se muestra que el espectro cerca al punto de Dirac  $\mathbf{K}$  es degenerado por los espinores<sup>4</sup>  $\psi_>$  y  $\psi_<$ , con números de onda  $k$  o  $-k$ , respectivamente.

Del espectro se encuentra una relación para  $k$  y los coeficientes de la función de onda (1.19) de la forma,

$$\bullet E \Rightarrow \begin{cases} k = \text{sgn}(E) \sqrt{\left(\frac{E}{\hbar\nu_F}\right)^2 - q^2} \Rightarrow u_B = \hbar\nu_F \frac{k+iq}{E} u_A, \\ -k = -\text{sgn}(E) \sqrt{\left(\frac{E}{\hbar\nu_F}\right)^2 - q^2} \Rightarrow u_B = -\hbar\nu_F \frac{k-iq}{E} u_A, \end{cases}$$

donde  $\text{sgn}(E)$  es la función signo<sup>5</sup>. Por lo tanto la solución general es una superposición de espinores linealmente independientes propagándose en dirección  $x$  positiva y en dirección  $x$  negativa,

$$\begin{aligned} \Psi^{\mathbf{K}} &= \Psi_>^{\mathbf{K}} + \Psi_<^{\mathbf{K}} \\ \begin{pmatrix} \psi_A^{\mathbf{K}} \\ \psi_B^{\mathbf{K}} \end{pmatrix} &= u_A e^{iqy} \left[ e^{ikx} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\alpha} \end{pmatrix} + e^{-ikx} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\alpha} \end{pmatrix} \right], \end{aligned} \quad (1.22)$$

con  $e^{\pm i\alpha} \equiv \hbar\nu_F \frac{k \pm iq}{E}$ .

#### 1.4.1.2. Punto de Dirac $\mathbf{K}'$

Debido a que el hamiltoniano de Dirac (1.7) en el punto  $\mathbf{K}'$  depende del tipo de frontera como se muestra en la ecuación (1.9) y ya que éste se puede relacionar via (1.10) con el hamiltoniano en el punto de Dirac  $\mathbf{K}$ , por medio del ansatz (1.19) se encuentra que la condición para que

<sup>4</sup>Donde los subíndices  $>$  y  $<$  hacen referencia a la dirección de propagación de las soluciones de la ecuación de Dirac (1.6).

<sup>5</sup>La función  $\text{sgn}(E)$  permite distinguir entre la banda de conducción y la banda de valencia como,

$$\text{sgn}(E) = \begin{cases} 1, & \text{si } E > 0 \\ -1, & \text{si } E < 0 \end{cases}$$

exista solución no trivial del hamiltoniano de Dirac (1.7) para cada condición de frontera es,

$$Armchair \Rightarrow \left\| \begin{array}{cc} -\frac{E_i}{\hbar v_F} & -k - iq \\ -k + iq & -\frac{E_i}{\hbar v_F} \end{array} \right\| = 0 \quad Zigzag \Rightarrow \left\| \begin{array}{cc} -\frac{E_i}{\hbar v_F} & k + iq \\ k - iq & -\frac{E_i}{\hbar v_F} \end{array} \right\| = 0, \quad (1.23)$$

donde el punto de Dirac  $\mathbf{K}'$  para el tipo de frontera *Zigzag* se determina al realizar el cambio  $q \rightarrow -q$  y para el tipo de frontera *Armchair* se realiza el cambio  $k \rightarrow -k$ .

Teniendo en cuenta que el espectro de energía en cercanías de los puntos de Dirac es independiente de éste, se determina que los valores propios observados para el punto de Dirac  $\mathbf{K}$  en la Fig. 1.6, son iguales para el punto  $\mathbf{K}'$  y por lo tanto también se presenta el degeneramiento debido los espinores  $\psi_<$  y  $\psi_>$ .

Con base en los cambios de coordenadas del vector de onda para cada tipo de frontera se determina que,

$$\begin{aligned} Armchair &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} k \rightarrow -k \therefore e^{i\alpha} \leftrightarrow -e^{-i\alpha}, \\ \\ Zigzag &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} q \rightarrow -q \therefore e^{i\alpha} \leftrightarrow e^{-i\alpha}, \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (1.24) \end{aligned}$$

con lo cual las soluciones en el valle  $\mathbf{K}'$  son dadas por,

- *Armchair*

$$\begin{pmatrix} \psi_A^{\mathbf{K}'} \\ \psi_B^{\mathbf{K}'} \end{pmatrix} = u'_A e^{iqy} \left[ e^{ikx} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\alpha} \end{pmatrix} + e^{-ikx} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\alpha} \end{pmatrix} \right]. \quad (1.25)$$

- *Zigzag*

$$\begin{pmatrix} \psi_A^{\mathbf{K}'} \\ \psi_B^{\mathbf{K}'} \end{pmatrix} = u'_A e^{iqy} \left[ e^{ikx} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\alpha} \end{pmatrix} + e^{-ikx} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\alpha} \end{pmatrix} \right]. \quad (1.26)$$

Las soluciones de los portadores de carga para el tipo de frontera *Armchair* (1.25) ó para el tipo de frontera *Zigzag* (1.26) son linealmente independientes.

Considerando el degeneramiento en el espectro debido a los valles  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  se debe incluir el termino  $e^{i\mathbf{K}(\cdot)\cdot\mathbf{r}}$  en los espinores (1.22), (1.25) ó (1.26) dependiendo del tipo de frontera a fin de obtener la función de onda (1.8) para cada tipo de valle. En la siguiente sección ilustraremos el uso de fronteras para mostrar la combinación ó no de las soluciones.

## 1.5. Superficie semi – infinita de Grafeno

Para ilustrar las condiciones de frontera se analizan las posibles dispersiones en una superficie semi – infinita de grafeno, donde un portador de carga que incide sobre la frontera con amplitud de probabilidad igual a la unidad, puede ser reflejado en el valle  $\mathbf{K}$  con amplitud de probabilidad  $C_0$  ó reflejado en el valle  $\mathbf{K}'$  con amplitud de probabilidad  $C_1$ . La función de onda del portador de carga teniendo en cuenta la frontera *Armchair* es,

$$\Phi = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}\Psi_>^{\mathbf{K}} + C_0 e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}\Psi_<^{\mathbf{K}} + C_1 e^{i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{r}}\Psi_<^{\mathbf{K}'Armchair}. \quad (1.27)$$

De la condición de frontera *Armchair* (1.11) en  $x = 0$  y con la ubicación de los puntos de Dirac sobre  $x$  se obtiene que,

$$\left[ e^{iK_D x} \Psi_{>}^{\mathbf{K}} + C_0 e^{iK_D x} \Psi_{<}^{\mathbf{K}} + C_1 e^{-iK_D x} \Psi_{<}^{\mathbf{K}' \text{Armchair}} \right] \Big|_{x=0} = \mathbf{0} \quad (1.28)$$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\alpha} \end{pmatrix} + C_0 \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\alpha} \end{pmatrix} + C_1 \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\alpha} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

donde se ha tenido en cuenta que la componente  $y$  del vector de onda (i.e.,  $q$ ) se conserva. De la relación (1.28) se determina el sistema de ecuaciones de los coeficientes como

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -e^{-i\alpha} & e^{i\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ -e^{i\alpha} \end{pmatrix} \quad (1.29)$$

cuya solución es

$$C_0 = \frac{0}{2 \cos(\alpha)} = 0 \quad (1.30a)$$

y

$$C_1 = \frac{-e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}}{2 \cos(\alpha)} = -1, \quad (1.30b)$$

donde se determina que en el tipo de frontera *Armchair*, incide por un valle y se refleja en el otro, es decir, mezcla valles.

Debido a que en el punto de Dirac  $\mathbf{K}'$  las funciones de onda dependen del tipo de frontera, se analiza el mismo sistema anterior pero con la función de onda del punto  $\mathbf{K}'$  teniendo la respectiva función de onda para el caso de frontera *Zigzag*, es decir,

$$\Phi = e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \Psi_{>}^{\mathbf{K}} + C_0 e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \Psi_{<}^{\mathbf{K}} + C_1 e^{i\mathbf{K}' \cdot \mathbf{r}} \Psi_{<}^{\mathbf{K}' \text{Zigzag}}, \quad (1.31)$$

por lo tanto, aplicando la condición de frontera *Zigzag* (1.15) en  $x = 0$ ,

$$e^{iK_D x} \psi_{A>}^{\mathbf{K}} + C_0 e^{iK_D x} \psi_{A<}^{\mathbf{K}} + C_1 e^{-iK_D x} \psi_{A<}^{\mathbf{K}' \text{Zigzag}} \Big|_{x=0} = 0, \quad (1.32)$$

se encuentra

$$(1 + C_0) + C_1 = 0, \quad (1.33)$$

cuya solución debe cumplir una de las siguientes posibilidades,

$$C_0 = 0 \quad \text{y} \quad C_1 = -1, \quad (1.34a)$$

ó

$$C_0 = -1 \quad \text{y} \quad C_1 = 0. \quad (1.34b)$$

En este caso la función de onda para la frontera *Zigzag* no combina valles, esto teniendo en cuenta que la condición para la solución (1.34b) permite encontrar que la norma de la función de onda (1.31) depende de  $x$ , mientras que para (1.34a) la norma es constante. Por lo tanto se determina que en el tipo de frontera *Zigzag*, incide por un valle y se refleja en el mismo, es decir, no mezcla valles.

Adicionalmente al efecto de las condiciones de frontera, por el espectro lineal del grafeno se presenta el *tunelamiento de Klein* el cual no se había observado en un sistema no relativista y es crucial para el estudio del transporte eléctrico en junturas con grafeno, a continuación se discute este fenómeno y se explica en el contexto del grafeno.

## 1.6. *Tunelamiento de Klein* en el grafeno

En las partículas que obedecen la ecuación de Dirac, la velocidad de propagación (i.e.,  $\nu_{\mathbf{g}}$ ) es independiente de la energía, de manera que presenta fenómenos únicos, e. g., que al incidir sobre una barrera de potencial (donde la altura es la energía asociada a la masa en reposo de las partículas) no sean retrodispersadas porque se conserva el espín, por lo tanto, la probabilidad de transmisión tiende a la unidad y puedan atravesar perfectamente la barrera de potencial. Este fenómeno es llamado *Tunelamiento de Klein* [41, 42] y se ilustra en la Fig. 1.7.

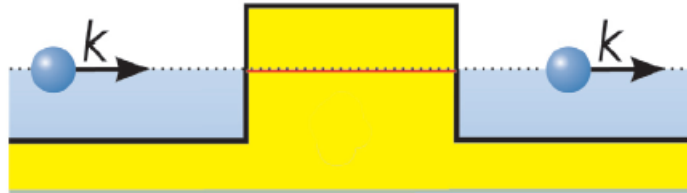


Fig. 1.7. El portador de carga incidente puede atravesar perfectamente una barrera de potencial sin disminuir la amplitud de incidencia, representada por el tamaño de la esfera. Gráfica adaptada del trabajo de Katsnelson [19].

Debido a que los portadores de carga en el grafeno a bajas energías de excitación se simulan como partículas sin masa en reposo por medio de la ecuación de Dirac, éstos responden de manera diferente en comparación con otros materiales cuando se estudian las propiedades de transporte en interfaces como se ilustra en la Fig. 1.8 [7, 19–21], ya que estos efectos se manifiestan en las propiedades de transporte como la conductancia diferencial.

En el grafeno el *tunelamiento de Klein* se presenta gracias a la conservación del *pseudoespín*, que es el grado de libertad asociado a las subredes  $A$  y  $B$  de la función de onda de los portadores de carga, y a que la energía a partir del cual se presentan estados desocupados coincida con la energía del portador de carga incidiendo como se observa en las figuras Fig. 1.8.a y Fig. 1.8.b. Esto debido a que los estados desocupados se comportan como una partículas de carga opuesta, los cuales serían el equivalente a los positrones (i.e., el análogo de materia condensada en partículas elementales). El *tunelamiento de Klein* en el grafeno se explica ya que el espectro de energía es simétrico entre electrones y huecos porque la masa efectiva de los portadores de carga en el grafeno es nula, es decir, los electrones y huecos son interconectados por la misma dinámica.

Un electrón incidiendo con *pseudoespín* paralelo al vector de onda se transmite en un estado

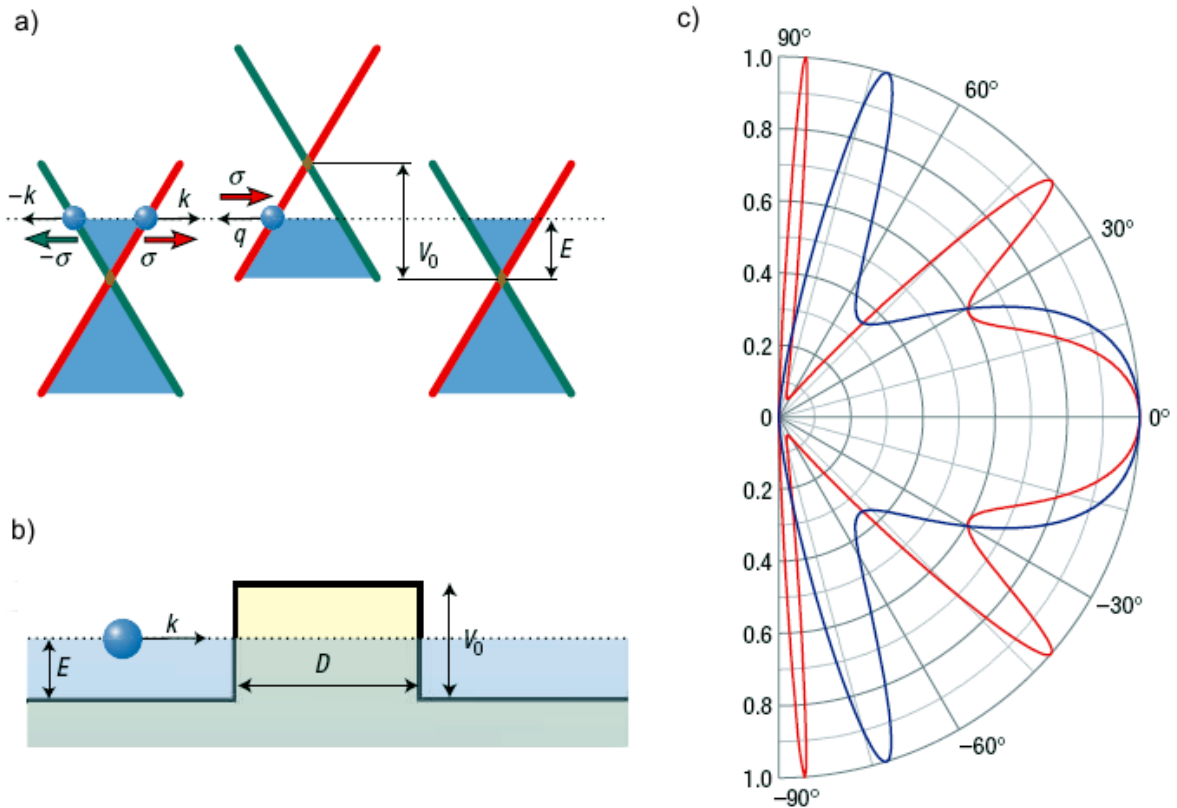


Fig. 1.8. *Tunelamiento de Klein* en el grafeno a una barrera de potencial de altura  $V_0$  y ancho  $D$  como una diferencia entre los niveles de Fermi del primer y segundo grafeno. *a)* Diagrama esquemático del espectro de energía a cada lado de la barrera de potencial, se distingue que el color rojo y el color verde corresponde al *pseudoespín*  $\sigma$  paralelo o antiparalelo al vector de onda del portador incidente  $\mathbf{k}$ , respectivamente. *b)* Se distingue que al disminuir el nivel de Fermi del segundo grafeno, desde el punto de vista del portador de carga que incide es una barrera de potencial cuya energía coincide con el nivel a partir del cual hay estados desocupados en la barrera. *c)* Probabilidad de transmisión en función del ángulo del portador de carga incidente. Los colores azul y rojo distinguen la altura de la barrera 285 meV y 200 meV, respectivamente. Gráfica adaptada del trabajo de Katsnelson [7].

desocupado como un hueco con *pseudoespín* antiparalelo al vector de onda (como se observa en la Fig. 1.8.a), pero con la misma dirección de la velocidad de grupo  $\nu_{\mathbf{g}}$  ya que se encuentra en la banda de valencia (i.e., un *Tunelamiento intrabanda* [21]), por lo tanto el *pseudoespín* se conserva a fin de preservar la *quiralidad*<sup>6</sup>. De la figura Fig. 1.8.c se distingue que la transmisión perfecta no se presenta a un ángulo de incidencia de  $90^\circ$  independiente de la altura de la barrera (i.e., la concentración de estados desocupados) y tiende a la unidad para un ángulo casi normal a la interfase, con un *pseudoperiodo*<sup>7</sup> y a medida que aumenta la altura de la barrera se amplía el intervalo de ángulos al cual se presenta la transmisión perfecta.

Considerando la barrera de potencial como la diferencia entre las energías de Fermi de dos

<sup>6</sup>El término *quiralidad* se refiere a la proyección del *pseudoespín*  $\sigma$  sobre el vector velocidad de propagación  $\nu_{\mathbf{g}}$  [21, 33].

<sup>7</sup>El término *pseudoperiodo* se refiere a que la probabilidad de transmisión no solo es máxima para un ángulo normal a la interfase, sino éste mismo comportamiento se presenta a ángulos diferentes.



grafenos<sup>8</sup>, un electrón que incide desde la banda de conducción de un grafeno ( $E > E_F$ ) con velocidad de grupo ( $\nu_g$ ) paralela al momentum  $\mathbf{p}$  penetra la barrera y se transmite al segundo grafeno con  $\nu_g$  antiparalela al momentum  $\mathbf{p}$  en la banda de valencia ( $E < E_F$ ), sin disminuir su amplitud de incidencia.

## 1.7. Discusión

El grafeno presenta una relación de dispersión lineal a bajas energías de excitación, por lo tanto se puede describir el comportamiento de los portadores de carga por medio de la ecuación de Dirac para partículas con masa en reposo nula<sup>9</sup>. Debido a la estructura hexagonal del grafeno se manifiestan dos puntos inequivalentes  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  (i.e., los *Puntos de Dirac*) donde se tocan las bandas de conducción y de valencia. Adicionalmente se pueden presentar dos tipos de condiciones de frontera los cuales son *Armchair* y *Zigzag*, las cuales combinan las soluciones de las ecuaciones de Dirac en dichos puntos ó no, respectivamente. Las soluciones linealmente independientes de la ecuación de Dirac en los puntos  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  están relacionadas teniendo en cuenta que se invierten las direcciones de propagación de los portadores de carga.

Debido a que el espectro de los portadores de carga es lineal se presenta el *Tunelamiento de Klein* en presencia de una barrera de potencial, y ya que la masa en reposo de los portadores de carga es nula no existe ninguna restricción de la altura de la barrera de potencial para que se presente el *Tunelamiento de Klein* o *tunelamiento intrabanda*, por otro lado se determina que la probabilidad de transmisión es máxima cuando el ángulo de incidencia es casi nulo, y medida que aumenta la altura de la barrera i.e., la concentración de estados desocupados el ángulo de incidencia debe ser cada vez mas normal a la interfase.

---

<sup>8</sup>La variación de la energía de Fermi se puede presentar por medio de potencial externos o por dopaje químico [1, 12].

<sup>9</sup>En el caso del grafeno la velocidad de propagación de los portadores de carga no es la velocidad de la luz en el vacío  $c$ , sino la velocidad de Fermi la cual es  $\approx \frac{c}{300}$ .



## SOLUCIONES DE LAS ECUACIONES DE BOGOLIUBOV - DE GENNES - DIRAC

Una de las áreas de interés que ha surgido desde la obtención del grafeno, es el estudio de interfases y junturas entre una superficie de grafeno en estado normal y una superficie de grafeno en estado superconductor al cual se le ha inducido la superconductividad por efecto proximidad [43–46]. Mediciones de corriente del efecto Josephson [11], reflexiones de Andreev [44], entre otras han mostrado que el estado base de estas laminas con superconductividad inducida está conformado por pares de Cooper y por consiguiente es posible usar las ecuaciones de Bogoliubov - de Gennes - Dirac (BdGD) para describir la dinámica de las cuasipartículas en la lamina con superconductividad. En este capítulo se describen las ecuaciones BdGD para un grafeno superconductor y se encuentran las soluciones generales de dichas ecuaciones el caso de un sistema homogéneo e infinito, las cuales usaremos en los próximos capítulos.

### 2.1. Ecuaciones de Bogoliubov - de Gennes - Dirac

Las ecuaciones planteadas por Bogoliubov y desarrolladas posteriormente por de Gennes [47], se construye teniendo en cuenta la teoría de la superconductividad propuesta por Bardeen, Cooper y Schrieffer (BCS) [48], y describen el comportamiento de las cuasipartículas<sup>10</sup>. Para el grafeno en estado superconductor se utiliza la aproximación de las ecuaciones de Bogoliubov - de Gennes - Dirac que son escritas matricialmente [8] como,

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}_G - E_{FS}\mathbf{I} & \Delta_G \\ \Delta_G^* & E_{FS}\mathbf{I} - \tilde{\mathcal{T}} \mathbf{H}_G \tilde{\mathcal{T}}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{v}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \mathbf{u}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{v}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

donde  $\mathbf{H}_G$  es el hamiltoniano del grafeno en el estado normal y describe la dinámica de los portadores de carga respecto a la energía de Fermi  $E_{FS}$ .

La función de onda de una cuasipartícula es dada por un espinor de dos componentes  $\begin{pmatrix} \mathbf{u}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{v}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$ , una de electrón y una de hueco descrita mediante las funciones  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$  y  $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ , respectivamente [47, 49, 50]. Dichas componentes a la vez son un espinor en el espacio de los valles  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$ , es decir,  $\mathbf{u}^T(\mathbf{r}) = (\mathbf{u}_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}), \mathbf{u}_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r})) \equiv (u_A, u_B, u'_A, u'_B)$  y  $\mathbf{v}^T(\mathbf{r}) = (\mathbf{v}_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}), \mathbf{v}_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r})) \equiv (v_A, v_B, v'_A, v'_B)$ , donde  $T$  representa la transpuesta.

La energía de excitación de las cuasipartículas  $E$  es medida con respecto al nivel de Fermi (i.e.,  $E > 0$ ),  $\Delta_G$  es el potencial de pares en el grafeno superconductor y  $\tilde{\mathcal{T}}$  es el operador de inversión temporal. El efecto del potencial de pares  $\Delta_G$  es acoplar las soluciones de electrones (huecos)

<sup>10</sup>Una cuasipartícula se crea al dispersar uno de los electrones de un par de Cooper a otro estado produciendo un par electrón - hueco, en este contexto el hueco denota un estado desocupado.

con las de hueco (electrones). El hamiltoniano que describe los huecos es obtenido al aplicar el operador inversión temporal<sup>11</sup>  $\tilde{\mathcal{T}}$ .

El grafeno en el estado superconductor presenta las mismas características que en el estado normal mencionadas en el capítulo anterior tales como la estructura, los puntos de Dirac y el carácter espinorial de la función de onda en cuanto a los índices de las subredes. A continuación se explican los términos de las ecuaciones de Bogoliubov - de Gennes - Dirac.

### 2.1.1. Hamiltoniano

El hamiltoniano del grafeno  $\mathbf{H}_{\mathbf{G}}$  es una matriz diagonal  $2 \times 2$  en el espacio de los valles, en donde la diagonal contiene el hamiltoniano de Dirac para los portadores de carga en cada punto de Dirac, es decir,

$$\mathbf{H}_{\mathbf{G}} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{\mathbf{K}} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{H}_{\mathbf{K}'} \end{pmatrix} = -i\hbar\nu_F \left( \begin{array}{cc|cc} \overbrace{0}^{\mathbf{K}} & \partial_x - i\partial_y & | & 0 & 0 \\ \partial_x + i\partial_y & 0 & | & 0 & 0 \\ - & - & -|- & - & - \\ 0 & 0 & | & 0 & -\partial_x - i\partial_y \\ 0 & 0 & | & -\partial_x + i\partial_y & 0 \end{array} \right) \Bigg\} \mathbf{K}' . \quad (2.2)$$

El hamiltoniano en el valle  $\mathbf{H}_{\mathbf{K}'}$  se escribe para frontera tipo *Armchair*, para frontera *Zigzag* se realiza el cambio  $\partial_y \rightarrow -\partial_y$  (como se determino en la relación (1.9)). En el hamiltoniano (2.2) los términos fuera de la diagonal, representan una interacción entre valles que es debida a potenciales externos o a condiciones de frontera como observamos en el capítulo 1.

### 2.1.2. Potencial de Pares

El potencial fuera de la diagonal en las ecuaciones de BdGD (2.1) es llamado potencial de pares  $\Delta_{\mathbf{G}}$  y su efecto es acoplar las componentes de electrón  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$  y de hueco  $\mathbf{v}(\mathbf{r})$  de momentum y espín opuesto, de manera que en el espacio de momentum  $\Delta_{\mathbf{G}}$  es,

$$\Delta_{\mathbf{G}} \equiv \begin{pmatrix} \overbrace{0}^{\mathbf{p}} & \overbrace{\Delta}^{-\mathbf{p}} \\ \Delta & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

y en el espacio recíproco se describe como,

$$\Delta_{\mathbf{G}} \equiv \left( \begin{array}{cc|cc} \overbrace{\Delta}^{\mathbf{K}} & 0 & | & 0 & 0 \\ 0 & \Delta & | & 0 & 0 \\ - & - & -|- & - & - \\ 0 & 0 & | & \Delta & 0 \\ 0 & 0 & | & 0 & \Delta \end{array} \right) \Bigg\} \mathbf{K}' , \quad (2.4)$$

<sup>11</sup>Esto es una consecuencia de que los pares de Cooper son formados por electrones con momentum y espín opuestos, los cuales preservan la simetría de inversión temporal.

donde se distingue en la relación (2.3), que se acoplan electrones con momentum  $\mathbf{p} \equiv \hbar\nu_F\mathbf{k}$  con huecos con momentum  $-\mathbf{p} \equiv -\hbar\nu_F\mathbf{k}$ . En el espacio recíproco<sup>12</sup>  $\Delta_{\mathbf{G}}$  acopla electrones y huecos del mismo valle  $\mathbf{K}$  ó  $\mathbf{K}'$  como se observa en la ecuación (2.4).

### 2.1.3. Operador de Inversión Temporal

El operador de inversión temporal  $\tilde{\mathfrak{T}}$  permite determinar que un proceso de dispersión sea invariante bajo la transformación  $t \rightarrow -t$ , es decir, que la probabilidad no cambia al invertir el tiempo. Esta transformación implica que,

$$\tilde{\mathfrak{T}}(\hat{\mathbf{x}}) = \hat{\mathbf{x}} \quad \text{y} \quad \tilde{\mathfrak{T}}(\hat{\mathbf{p}}) = -\hat{\mathbf{p}}, \quad (2.5)$$

es decir, el operador inversión temporal invierte el momentum lineal sin invertir la posición [51, 52].

Por lo tanto el operador de inversión temporal  $\tilde{\mathfrak{T}}$  en superconductividad relaciona las componentes  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$  y  $\mathbf{v}(\mathbf{r})$  de la función de onda de la cuasipartícula, como

$$\tilde{\mathfrak{T}} \begin{pmatrix} \mathbf{u}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{v}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathbf{v}^*(\mathbf{r}) \\ \mathbf{u}^*(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

de manera que ambas funciones de onda tienen espín y momentum opuesto y son ortogonales entre sí ya que éstas corresponden al mismo valor de energía de excitación.

Debido a la presencia de los valles (i.e., puntos de Dirac)  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  cuyas componentes de vector de onda  $\mathbf{k}$  son opuestas, el efecto del operador de inversión temporal en el grafeno es intercambiar los portadores de carga entre los valles [8, 21], lo que conduce a la forma

$$\tilde{\mathfrak{T}} \equiv \begin{pmatrix} \overbrace{0}^{\mathbf{K}} & \overbrace{\sigma_z}^{\mathbf{K}'} \\ \sigma_z & 0 \end{pmatrix} \mathcal{C} = \tilde{\mathfrak{T}}^{-1}, \quad (2.7)$$

donde  $\sigma_z$  es la matriz de Pauli que opera en el espacio de las subredes,  $\mathcal{C}$  es el operador complejo conjugado. En el caso del grafeno en ausencia de campos magnéticos el operador de inversión temporal  $\tilde{\mathfrak{T}}$  en las ecuaciones BdGD (2.1) es<sup>13</sup>,

$$\tilde{\mathfrak{T}} \mathbf{H}_{\mathbf{G}} \tilde{\mathfrak{T}}^{-1} \equiv \mathbf{H}_{\mathbf{G}}. \quad (2.8)$$

Explicado cada uno de los términos de las ecuaciones BdGD (2.1), se determina que ésta se puede separar en dos ecuaciones desacopladas que describen el comportamiento de las cuasipartículas en cada valle, como,

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}_{\mathbf{K}} - E_{FS}\mathbf{I} & \Delta\mathbf{I} \\ \Delta\mathbf{I} & -\mathbf{H}_{\mathbf{K}} + E_{FS}\mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{v}_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{v}_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}_{\mathbf{K}'} - E_{FS}\mathbf{I} & \Delta\mathbf{I} \\ \Delta\mathbf{I} & -\mathbf{H}_{\mathbf{K}'} + E_{FS}\mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{v}_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{v}_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

<sup>12</sup>Espacio de vector de onda  $\mathbf{K}$ .

<sup>13</sup>En el apéndice A, se ilustra el efecto del operador de inversión temporal en el hamiltoniano de Dirac.

A continuación se resuelven las ecuaciones de BdGD (2.1) para un grafeno superconductor con el propósito de encontrar las soluciones generales que nos permitan la descripción de las cuasipartículas en el mismo.

## 2.2. Soluciones Generales de un grafeno en estado superconductor

Se resuelven las ecuaciones de BdGD (2.9) y (2.10) para una lámina de grafeno superconductora homogénea cuyo potencial de pares es isotrópico, (i.e., considerando  $\Delta \equiv \Delta_0 \equiv cte$ ), con el propósito de encontrar las soluciones generales que permitirán más adelante analizar el efecto del acoplamiento de diferentes interfaces.

### 2.2.1. Ansatz para el Grafeno en estado superconductor

Utilizamos como Ansatz que la solución del grafeno en estado superconductor se puede expresar como el producto espinorial entre la solución del hamiltoniano de una partícula de Dirac<sup>14</sup> y el espinor de las amplitudes de probabilidad de un electrón  $u$  o un hueco  $v$  [47],

$$\begin{pmatrix} \mathbf{u}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{v}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} u\Psi^{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \\ v\Psi^{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

con  $u, v$  constantes,  $\Psi^{\mathbf{K}}$  son soluciones del hamiltoniano de Dirac correspondientes al valor propio  $E \equiv \hbar\nu_F\sqrt{k^2 + q^2}$  dadas como,

$$\begin{aligned} \Psi^{\mathbf{K}}_{>} &= \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\alpha} \end{pmatrix}, \\ \Psi^{\mathbf{K}}_{<} &= \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\alpha} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

En la expresión (2.11) el espinor solución en el grafeno en el estado superconductor, son ondas planas moduladas por los coeficientes dados por las componentes del espinor solución  $\Psi^{\mathbf{K}}$  y por la amplitud de la componente de electrón  $u$  o de hueco  $v$ . La escogencia de los espinores  $\Psi^{\mathbf{K}}_{>(<)}$  se basa en el hecho de considerar la dirección de propagación de la velocidad de grupo.

Debido a que las soluciones en el punto de Dirac  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  están relacionadas como se discutió en la sección 1.4.1.2, a continuación se soluciona explícitamente las ecuaciones de BdGD para el valle  $\mathbf{K}$ , mientras que las soluciones en el punto de Dirac  $\mathbf{K}'$  son determinadas via la relación (1.9).

---

<sup>14</sup>Esta aproximación ha sido discutida por de Gennes [47, Cap. 5] en el caso convencional para determinar la solución de las ecuaciones de BdG de un superconductor en términos de las soluciones del Hamiltoniano de una partícula del metal normal.

### 2.2.2. Espinores en el punto de Dirac $\mathbf{K}$

Reemplazando el ansatz (2.11) en las ecuaciones de BdGD (2.9) encontramos el siguiente sistema de ecuaciones para las constantes  $u$  y  $v$

$$\begin{pmatrix} \hbar\nu_F\sqrt{k^2+q^2} - E_{FS} - E & \Delta \\ \Delta & -\hbar\nu_F\sqrt{k^2+q^2} + E_{FS} - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

La condición para que la solución de (2.13) no sea trivial es,

$$\left\| \begin{pmatrix} \hbar\nu_F\sqrt{k^2+q^2} - E_{FS} - E & \Delta \\ \Delta & -\hbar\nu_F\sqrt{k^2+q^2} + E_{FS} - E \end{pmatrix} \right\| = 0, \quad (2.14)$$

de manera que el espectro de energía de un grafeno en estado superconductor es

$$E_{\pm} = \pm\sqrt{\Delta^2 + \left(\hbar\nu_F\sqrt{k^2+q^2} - E_{FS}\right)^2}, \quad (2.15)$$

donde el valor de  $\Delta$  es un gap en el espectro de excitación como se observa en la Fig. 2.1 [8],

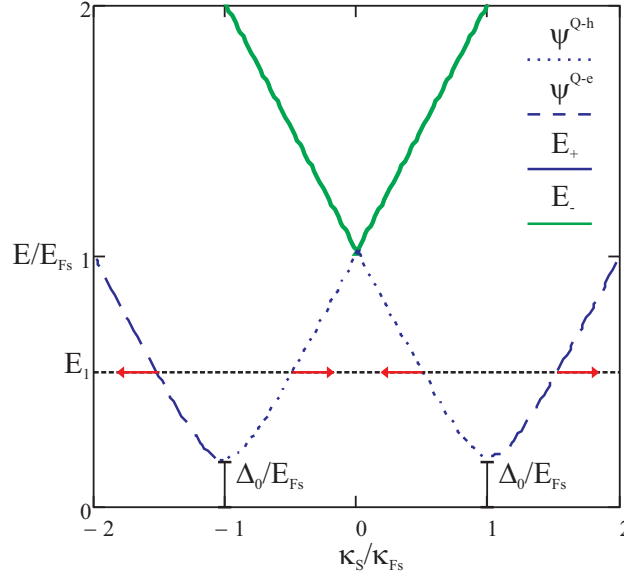


Fig. 2.1. Soluciones del espectro del grafeno en el estado superconductor en el punto de Dirac  $\mathbf{K}$ . Los colores azul y verde de las líneas representan las bandas conducción  $E_+$  y de valencia  $E_-$  respectivamente. Las líneas a trozos representan las soluciones para cuasipartículas tipo electrón y la punteada representa las soluciones para cuasipartículas tipo hueco. Se distingue que a un mismo valor de energía le corresponden las soluciones de ambas cuasipartículas cuya dirección del vector de onda es representada por las flechas.

De (2.15) obtenemos dos ramas  $\pm$ , una debida a la banda de conducción (+) y la otra a la banda de valencia (-). Dado que  $\Delta_0 \ll E_{FS}$  no se tiene en cuenta la rama<sup>15</sup>  $E_-$  y de ahora en adelante trabajaremos únicamente con la banda de conducción  $E_+ \equiv E$ .

<sup>15</sup>Esta aproximación se denomina *aproximación de Andreev* y es utilizada en superconductividad debido a que la energía de Fermi del superconductor es del orden de 100 veces o más que el potencial de pares (ver [21, 32–34]).

Es de distinguir que para un mismo valor de energía existen cuatro vectores propios independientes de las ecuaciones de BdGD (2.9), que denominamos  $\pm k_{qe(qh)}$  donde

$$k_{qe(qh)} = \sqrt{\left(\frac{E_{FS} + \epsilon\Omega}{\hbar\nu_F}\right)^2 - q^2}, \quad (2.16)$$

donde  $\Omega \equiv \sqrt{E^2 - \|\Delta_0\|^2}$  y  $\epsilon \equiv \pm$ .

El signo + de  $\epsilon$  hace referencia a cuasipartículas que se mueven con energía por encima del nivel de Fermi (que se denominan *cuasipartícula tipo electrón qe*), con velocidad de grupo  $\nu_{\mathbf{g}}$  paralela a la dirección del vector de onda  $\mathbf{k}$ , mientras el signo – de  $\epsilon$  hace referencia a cuasipartículas que se mueven con energía por debajo del nivel de Fermi (que se denominan *cuasipartícula tipo hueco qh*), con velocidad de grupo  $\nu_{\mathbf{g}}$  opuesta a la dirección del vector de onda  $\mathbf{k}$ .

Por lo tanto la función de onda de las cuasipartículas de un grafeno en estado superconductor, en el punto  $\mathbf{K}$  está dada por la superposición de los espinores para cada tipo de cuasipartícula<sup>16</sup> como,

$$\begin{aligned} \Phi_{S_{\mathbf{K}}}(\mathbf{r}) &= \Psi_{>}^{qe}(\mathbf{r}) + \Psi_{<}^{qe}(\mathbf{r}) + \Psi_{<}^{qh}(\mathbf{r}) + \Psi_{>}^{qh}(\mathbf{r}), \\ &= e^{iqy} \left\{ e^{ik_{qe}x} \begin{pmatrix} u_0 \\ e^{i\alpha_{qe}} u_0 \\ v_0 \\ e^{i\alpha_{qe}} v_0 \end{pmatrix} + e^{-ik_{qe}x} \begin{pmatrix} u_0 \\ -e^{-i\alpha_{qe}} u_0 \\ v_0 \\ -e^{-i\alpha_{qe}} v_0 \end{pmatrix} \right. \\ &\quad \left. + e^{ik_{qh}x} \begin{pmatrix} v_0 \\ e^{i\alpha_{qh}} v_0 \\ u_0 \\ e^{i\alpha_{qh}} u_0 \end{pmatrix} + e^{-ik_{qh}x} \begin{pmatrix} v_0 \\ -e^{-i\alpha_{qh}} v_0 \\ u_0 \\ -e^{-i\alpha_{qh}} u_0 \end{pmatrix} \right\}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

con  $e^{\pm i\alpha_{qe}} = \hbar\nu_F \frac{k_{qe} \pm iq}{E_{FS} + \Omega}$  y  $e^{\pm i\alpha_{qh}} = \hbar\nu_F \frac{k_{qh} \pm iq}{E_{FS} - \Omega}$ . En la función de onda (2.17) se tiene en cuenta que la velocidad de grupo  $\nu_{\mathbf{g}}$  asociada a una  $qh$  es opuesta a la dirección del vector de onda  $\mathbf{k}$ .

### 2.2.3. Espinores en el punto de Dirac $\mathbf{K}'$

Debido a que el hamiltoniano de Dirac en el valle  $\mathbf{K}'$  depende del tipo de condición de frontera como se discutió en la sección 1.4.1.2, esta dependencia también se presenta en las ecuaciones de BdGD (2.10). Por lo tanto usando el mismo ansatz y realizando los cambios de variable (1.9) dados por

$$\begin{aligned} \textit{Armchair} &\Rightarrow \left\{ k \rightarrow -k \therefore e^{i\alpha} \leftrightarrow -e^{-i\alpha}, \right. \\ \textit{Zig - Zag} &\Rightarrow \left\{ q \rightarrow -q \therefore e^{i\alpha} \leftrightarrow e^{-i\alpha}. \right. \end{aligned} \quad (1.9)$$

La función de onda de las cuasipartículas en el punto  $\mathbf{K}'$  está dada por una superposición de la forma,

<sup>16</sup>La relación entre la amplitud  $u$  de la componente de electrón y la amplitud  $v$  de la componente de hueco de la cuasipartícula se puede observar en el apéndice (B)



- *Armchair*

$$\begin{aligned}
\Phi_{S_{K'}}(\mathbf{r}) &= \Psi_{>}^{qe'}(\mathbf{r}) + \Psi_{<}^{qe'}(\mathbf{r}) + \Psi_{<}^{qh'}(\mathbf{r}) + \Psi_{>}^{qh'}(\mathbf{r}), \\
&= e^{iqy} \left\{ e^{ik_{qe}x} \begin{pmatrix} u_0 \\ -e^{-i\alpha_{qe}} u_0 \\ v_0 \\ -e^{-i\alpha_{qe}} v_0 \end{pmatrix} + e^{-ik_{qe}x} \begin{pmatrix} u_0 \\ e^{i\alpha_{qe}} u_0 \\ v_0 \\ e^{i\alpha_{qe}} v_0 \end{pmatrix} \right. \\
&\quad \left. + e^{ik_{qh}x} \begin{pmatrix} v_0 \\ -e^{-i\alpha_{qh}} v_0 \\ u_0 \\ -e^{-i\alpha_{qh}} u_0 \end{pmatrix} + e^{-ik_{qh}x} \begin{pmatrix} v_0 \\ e^{i\alpha_{qh}} v_0 \\ u_0 \\ e^{i\alpha_{qh}} u_0 \end{pmatrix} \right\}, \tag{2.18}
\end{aligned}$$

- *Zigzag*

$$\begin{aligned}
\Phi_{S_{K'}}(\mathbf{r}) &= \Psi_{>}^{qe'}(\mathbf{r}) + \Psi_{<}^{qe'}(\mathbf{r}) + \Psi_{<}^{qh'}(\mathbf{r}) + \Psi_{>}^{qh'}(\mathbf{r}), \\
&= e^{iqy} \left\{ e^{ik_{qe}x} \begin{pmatrix} u_0 \\ e^{-i\alpha_{qe}} u_0 \\ v_0 \\ e^{-i\alpha_{qe}} v_0 \end{pmatrix} + e^{-ik_{qe}x} \begin{pmatrix} u_0 \\ -e^{i\alpha_{qe}} u_0 \\ v_0 \\ -e^{i\alpha_{qe}} v_0 \end{pmatrix} \right. \\
&\quad \left. + e^{ik_{qh}x} \begin{pmatrix} v_0 \\ e^{-i\alpha_{qh}} v_0 \\ u_0 \\ e^{-i\alpha_{qh}} u_0 \end{pmatrix} + e^{-ik_{qh}x} \begin{pmatrix} v_0 \\ -e^{i\alpha_{qh}} v_0 \\ u_0 \\ -e^{i\alpha_{qh}} u_0 \end{pmatrix} \right\}, \tag{2.19}
\end{aligned}$$

en las funciones de onda (2.18) y (2.19) se tiene en cuenta que la velocidad de grupo  $\nu_{\mathbf{g}}$  asociada a una  $qh$  es opuesta a la dirección del vector de onda  $\mathbf{k}$ .

Debido a la dinámica particular de los portadores de carga en el grafeno a bajas energías de excitación (como se observó en la Fig. 1.4), éstos se dispersan de manera diferente en comparación con otros materiales [21]. A continuación se discute el proceso de dispersión en una juntura grafeno normal y grafeno superconductor, ya que éste es fundamental para el estudio de propiedades de transporte eléctrico en juntas que involucran el grafeno discutidas en los próximos capítulos.

## 2.3. Reflexiones de Andreev

El potencial de pares es el responsable de la superconductividad y como mostramos en el espectro de las excitaciones en el caso de superconductores homogéneos (2.15) éste se manifiesta como un gap; además, permite que aparezcan canales de dispersión electrón – hueco y hueco – electrón. Por ejemplo, en una juntura metal normal - superconductor<sup>17</sup> **NS** un electrón que incide desde la región normal hacia el superconductor puede ser reflejado como un hueco transmitiendo un par de Cooper en el superconductor<sup>18</sup>, como se ilustra en la Fig. 2.2. Cuando el hueco es reflejado

<sup>17</sup>Esta dispersión de Andreev no es exclusiva de juntas **NS**, sino que se presenta en cualquier junta donde se presente un superconductor inhomogéneo, ya que es un efecto del potencial de pares.

<sup>18</sup>Ya que el electrón y hueco tienen carga opuesta  $\pm e$ , respectivamente, una carga de  $2e$  es absorbida por el superconductor como un par de Cooper para conservar la carga.

en la banda de conducción su velocidad de grupo es opuesta a la del electrón incidente y se denomina retroreflexión, dado que el hueco y el electrón están en la misma banda se denominan intra – banda como se ilustra en la Fig. 2.3.a.

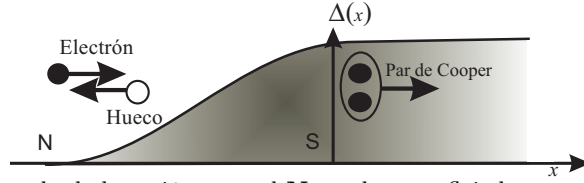


Fig. 2.2. Un electrón incidente desde la región normal **N** puede ser reflejado como hueco y un par de Cooper es inducido en la región superconductora **S**. El potencial de pares varía suavemente a lo largo del eje  $x$ .

Para el caso del grafeno el hueco reflejado puede estar en la banda de valencia, en esta banda la velocidad de grupo del hueco  $\nu_h$  está en la misma dirección del vector de onda, de tal manera que un hueco reflejado tiene  $\nu_h$  positiva en la dirección  $y$  y negativa en la dirección  $x$ , por lo tanto se refleja especularmente como se observa en la Fig. 2.3.b.

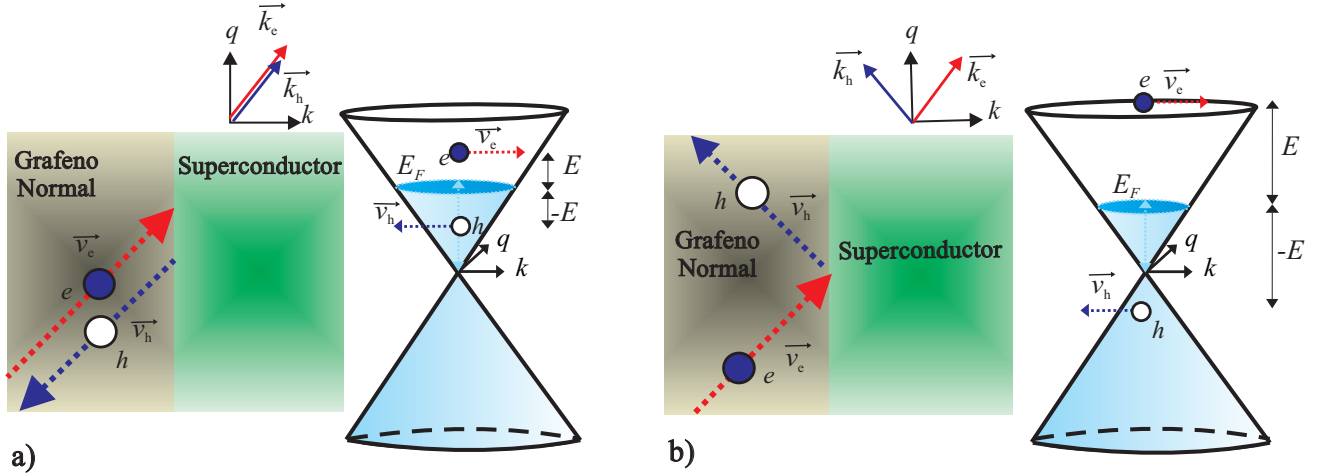


Fig. 2.3. Proceso de dispersión de Andreev en la estructura de bandas de un grafeno dopado (i.e.,  $E_F \neq 0$ ). Los vectores (velocidad de grupo  $\nu_g$  y vector de onda  $k$ ) en color rojo están relacionados con el electrón y en color azul están relacionados con el hueco. En el gráfico se ilustra que la energía de excitación, con respecto a la energía de Fermi  $E_F$  de un electrón es  $E$  y la energía de excitación de un hueco es  $-E$  y que los dos tipos de dispersión son a) Reflexión de Andreev intra – banda ó *retroreflexión* (el hueco se refleja con velocidad de grupo  $\nu_g$  en dirección opuesta a la del electrón incidente). b) Reflexión de Andreev inter – banda ó *reflexión especular* (el hueco se refleja con componente  $x$  de la velocidad de grupo  $\nu_g$  opuesta a la del electrón).

Las reflexiones de Andreev pueden ser *retroreflexión* llamada también reflexiones intra – banda ó *especular* conocidas como reflexión inter – banda [8, 21]. Las reflexiones especulares se presentan debido al *gap* nulo entre la banda de conducción y la banda de valencia del grafeno en los puntos de Dirac, como se observa en la Fig. 2.3.b.

En el caso de grafeno dopado ( $E_F \neq 0$ ) como se observa en la Fig. 2.3, se pueden presentar los dos tipos de reflexiones dependiendo del valor de energía de excitación  $E$  con respecto a la energía de Fermi  $E_F$ . Cuando la energía de excitación es mayor a la energía de Fermi (i.e.,  $E > E_F$ ) la reflexión es inter – banda, en cambio cuando la energía de excitación es menor a la energía de Fermi (i.e.,  $E < E_F$ ) la reflexión es intra – banda. En el caso de un grafeno no dopado ( $E_F = 0$ ) no existe una restricción sobre la energía de excitación y todas las reflexiones

son inter – banda.

## 2.4. Discusión

El grafeno en estado superconductor presenta dos bandas en el espectro de las cuasipartículas debidas a la existencia de un *gap* nulo entre la banda de conducción y la banda de valencia propia del grafeno. Teniendo en cuenta que las energías de excitación que se consideran son del orden del potencial de pares, se analiza únicamente la banda de conducción del espectro de las cuasipartículas.

Cuando se consideran interfases entre materiales normales y superconductores se presentan reflexiones de Andreev o retroreflexiones; en el caso de una junturas grafeno superconductor (donde el superconductor es un grafeno al cual se le a inducido superconductividad por efecto de proximidad) las reflexiones de Andreev que se presentan pueden ser de dos tipos, retroreflexiones ó reflexiones especulares las cuales son inter - banda o intra - banda, respectivamente. Dichas reflexiones se presentan independientemente del tipo de frontera y dependen únicamente de la energía de Fermi  $E_F$  (i.e., dopaje) y de la energía de excitación  $E$ .

En los capítulos siguientes se encontrarán explícitamente los coeficientes de reflexión para junturas con fronteras *Armchair* y *Zigzag*.



# REFLEXIONES DE ANDREEV Y PROPIEDADES DE TRANSPORTE EN INTERFASES CON FRONTERA ZIGZAG

Desde la obtención del grafeno se han hecho estudios de las propiedades de transporte, tales como conductancia diferencial [21, 53], características de corriente - voltaje [54–56], efecto Josephson [57], ruido de emisión diferencial [58] en juntas que involucran grafeno. El interés en el estudio de estas propiedades se basa en el espectro de energía del grafeno y en el transporte no convencional de los portadores de carga que cumplen la ecuación de Dirac, es decir de fermiones de Dirac no masivos. En este capítulo se determinan los coeficientes de reflexión para una junta grafeno en estado normal - grafeno en estado superconductor **GS** con frontera *Zigzag*, para diferentes valores de dopaje del grafeno en estado normal, para posteriormente a partir de estos coeficientes determinar la conductancia diferencial por medio del modelo de Blonder, Tinkham, Klapwijk (BTK) [59]. Por último analizamos el efecto de incluir una barrera aislante en la interfase **GS** y analizaremos el efecto que tiene el aislante sobre los coeficientes de reflexión y la conductancia diferencial.

## 3.1. Interfases con Grafeno

Consideramos una junta formada por una película de grafeno en estado normal que se extiende de  $-\infty$  a 0 y una película de grafeno en el estado superconductor de 0 a  $\infty$ , las cuales son homogéneas e infinitas en la dirección  $y$  como se ilustra en la Fig. 3.1.

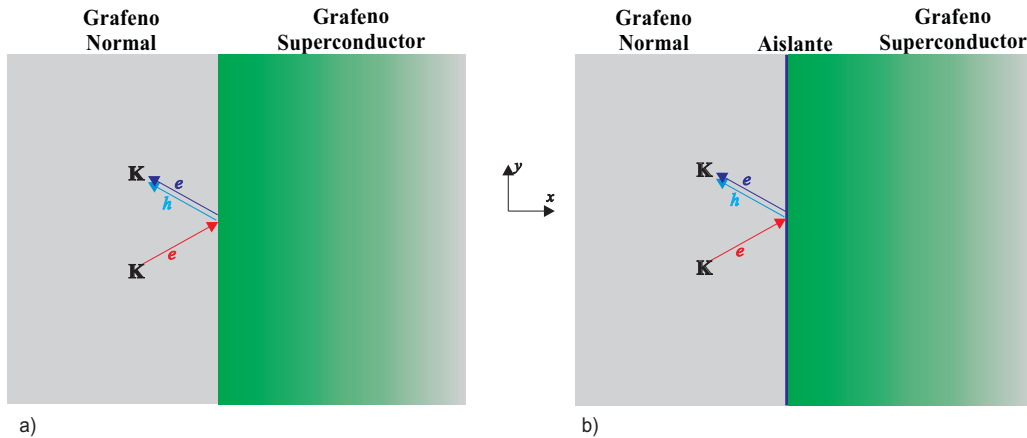


Fig. 3.1. Junta grafeno en estado normal - grafeno en estado superconductor con frontera *Zigzag*. En el gráfico se ilustra que la interfase se realiza en el eje  $x$ . En la grafica se distingue que un electrón incide desde el valle **K** (flecha de color rojo) que puede ser reflejado como hueco (flecha de color azul claro) o como electrón (flecha de color azul oscuro). Los mismo procesos de dispersión se presentan para cada una de las interfases a) **GS**. b) **GIS**.

En el grafeno la superconductividad se puede inducir por efecto de proximidad [43–46, 60]. Por lo tanto el potencial de pares es modelado de tal manera que en la región normal es cero y en la región superconductor es constante e isotrópico, es decir,

$$\Delta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0, \\ \Delta_0 & x \geq 0. \end{cases} \quad (3.1)$$

Con base en la discusión acerca del tipo de frontera *Zigzag* realizada en la sección 1.3.2, se analizan los procesos de dispersión únicamente en el valle  $\mathbf{K}$  asumiendo que un electrón incide hacia la interfase propagándose en el mismo valle. A continuación se analizan los coeficientes de reflexión y se determina la conductancia diferencial en interfases que involucran grafeno en estado normal y grafeno en estado superconductor cuando se tienen diferentes energías de Fermi  $E_F$  del grafeno en estado normal.

### 3.2. Juntura Grafeno en Estado Normal - Grafeno en Estado Superconductor

Considerando a un electrón que incide desde el grafeno normal hacia la interfase con una amplitud de probabilidad igual a uno, éste puede ser reflejado como un electrón con una amplitud de probabilidad  $u_1$  o como un hueco con una amplitud de probabilidad  $v_1$  [8], de manera que la función de onda en la región normal está dada por

$$\begin{aligned} \Phi_G(\mathbf{r}) &= \Psi_{>}^e(\mathbf{r}) + \Psi_{<}^e(\mathbf{r}) + \Psi_{<}^h(\mathbf{r}), \\ &= e^{iK_D x} e^{iqy} \left\{ e^{ik_e x} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\alpha_e} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + u_1 e^{-ik_e x} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\alpha_e} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + v_1 e^{ik_h x} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ e^{i\alpha_h} \end{pmatrix} \right\}, \end{aligned} \quad (3.2)$$

donde hemos usado las soluciones halladas en (1.22) y utilizado las definiciones para un grafeno en estado normal dopado ( $E_F \neq 0$ ) de

$$e^{i\alpha_{e(h)}} \equiv \hbar v_F \frac{k_{e(h)} + iq}{E \pm E_F}, \quad (3.3)$$

donde el signo  $+$  corresponde a electrón y el signo  $-$  corresponde a hueco.

Por otro lado en la región superconductor se pueden transmitir cuasipartículas con velocidad de grupo positiva, por lo tanto de (2.17) la función de onda es escrita como

$$\begin{aligned} \Phi_S(\mathbf{r}) &= \Psi_{>}^{qe}(\mathbf{r}) + \Psi_{<}^{qh}(\mathbf{r}), \\ &= e^{iK_D x} e^{iqy} \left\{ e^{ik_{qe} x} C_{qe}^+ \begin{pmatrix} u_0 \\ e^{i\alpha_{qe}} u_0 \\ v_0 \\ e^{i\alpha_{qe}} v_0 \end{pmatrix} + e^{-ik_{qh} x} C_{qh}^- \begin{pmatrix} v_0 \\ -e^{-i\alpha_{qh}} v_0 \\ u_0 \\ -e^{-i\alpha_{qh}} u_0 \end{pmatrix} \right\}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

donde  $C_{qe}^+$  es la amplitud de probabilidad de transmisión de cuasipartículas tipo electrón y  $C_{qh}^-$  es la amplitud de probabilidad de transmisión de cuasipartículas tipo hueco.

Las amplitudes  $u_1$ ,  $v_1$ ,  $C_{qe}^+$  y  $C_{qh}^-$  son obtenidas a partir de las condiciones de frontera en  $x = 0$ , y debido a que las ecuaciones de BdGD son de primer orden, solo es necesario exigir la continuidad de la función de onda, por lo tanto

$$\Phi_G(\mathbf{r}) \Big|_{x=0} = \Phi_S(\mathbf{r}) \Big|_{x=0}, \quad (3.5)$$

donde las funciones  $\Psi_G(\mathbf{r})$  y  $\Psi_S(\mathbf{r})$  son dadas por (3.2) y (3.4), respectivamente, y como son bi-espinoriales obtenemos un sistema de ecuaciones  $4 \times 4$ . Solucionando este sistema encontramos que las amplitudes de probabilidad son,

$$u_1(E, q) = \frac{v_0^2 (e^{-i\alpha_{qh}} + e^{i\alpha_e}) (e^{i\alpha_{qe}} - e^{i\alpha_h}) - u_0^2 (e^{-i\alpha_{qh}} + e^{i\alpha_h}) (e^{i\alpha_{qe}} - e^{i\alpha_e})}{u_0^2 (e^{i\alpha_{qe}} + e^{-i\alpha_e}) (e^{-i\alpha_{qh}} + e^{i\alpha_h}) + v_0^2 (e^{-i\alpha_e} - e^{-i\alpha_{qh}}) (e^{i\alpha_{qe}} - e^{i\alpha_h})}, \quad (3.6a)$$

$$v_1(E, q) = \frac{2u_0v_0 (e^{i\alpha_{qe}} + e^{-i\alpha_{qh}}) \cos(\alpha_e)}{u_0^2 (e^{i\alpha_{qe}} + e^{-i\alpha_e}) (e^{-i\alpha_{qh}} + e^{i\alpha_h}) + v_0^2 (e^{-i\alpha_e} - e^{-i\alpha_{qh}}) (e^{i\alpha_{qe}} - e^{i\alpha_h})}, \quad (3.6b)$$

$$C_{qe}^+(E, q) = \frac{2u_0 (e^{-i\alpha_{qh}} + e^{i\alpha_h}) \cos(\alpha_e)}{u_0^2 (e^{i\alpha_{qe}} + e^{-i\alpha_e}) (e^{-i\alpha_{qh}} + e^{i\alpha_h}) + v_0^2 (e^{-i\alpha_e} - e^{-i\alpha_{qh}}) (e^{i\alpha_{qe}} - e^{i\alpha_h})}, \quad (3.6c)$$

$$C_{qh}^-(E, q) = \frac{2v_0 (e^{i\alpha_{qe}} - e^{i\alpha_h}) \cos(\alpha_e)}{u_0^2 (e^{i\alpha_{qe}} + e^{-i\alpha_e}) (e^{-i\alpha_{qh}} + e^{i\alpha_h}) + v_0^2 (e^{-i\alpha_e} - e^{-i\alpha_{qh}}) (e^{i\alpha_{qe}} - e^{i\alpha_h})}, \quad (3.6d)$$

donde  $u_0$  y  $v_0$  son los factores BCS de una cuasipartícula [47] que definimos en (B.1) y (B.2)

$$u_0 \equiv \sqrt{\frac{1}{2}} \sqrt{1 + \frac{\sqrt{E^2 - \|\Delta_0\|^2}}{E}} = \sqrt{\frac{1}{2}} \sqrt{1 + \frac{\Omega}{E}}, \quad (B.1)$$

$$v_0 \equiv \sqrt{\frac{1}{2}} \sqrt{1 - \frac{\sqrt{E^2 - \|\Delta_0\|^2}}{E}} = \sqrt{\frac{1}{2}} \sqrt{1 - \frac{\Omega}{E}}, \quad (B.2)$$

y los factores exponenciales son definidos como

$$e^{\pm i\alpha_{qe(qh)}} = \hbar\nu_F \frac{k_{qe(qh)} \pm iq}{E_{FS} + (-)\Omega}. \quad (3.7)$$

A continuación se determinan los coeficientes de reflexión de electrón – electrón y los coeficientes de reflexión de electrón - hueco (también llamados como coeficientes de *Andreev*) para la junta.

### 3.2.1. Coeficientes de Reflexión

Con base en la densidad de corriente de probabilidad  $J_{\Psi_x}$  en dirección  $x$  es posible determinar los coeficientes de reflexión electrón – electrón y electrón - hueco, como<sup>19</sup>,

$$R_{e-e}(E, q) \equiv \left\| \frac{J_{\Psi_G}^{<e}(E, q)}{J_{\Psi_G}^{>e}(E, q)} \right\| = \|u_1(E, q)\|^2, \quad (3.8a)$$

<sup>19</sup> La demostración de la densidad de corriente de probabilidad de la ecuación de Dirac  $\mathbf{J}_{\Psi_G}$  se puede observar en el apéndice C

y

$$R_{e-h}(E, q) \equiv \left\| \frac{J_{\Psi_G}^{<h}(E, q)}{J_{\Psi_G}^{>}(E, q)} \right\| = \left\| v_1(E, q)^2 \frac{\cos(\alpha_h(E, q))}{\cos(\alpha_e(E, q))} \right\|, \quad (3.8b)$$

donde  $\mathbf{J}_{\Psi_G}^{<e(h)}$  es la densidad de corriente de probabilidad del electrón (hueco) reflejado para la función de onda (3.2) y  $\mathbf{J}_{\Psi_G}^{>}$  es la densidad de corriente de probabilidad del electrón incidente. De los coeficientes de reflexión (3.8) se puede analizar los casos límites en un grafeno en estado normal, poco dopado (i.e.,  $E_F \approx 0$ ) en el cual la mayoría de las reflexiones son especulares, o fuertemente dopado (i.e.,  $E_F \approx E_{FS}$ ) donde únicamente se presentan retroreflexiones como se observa en la figura Fig. 3.2,

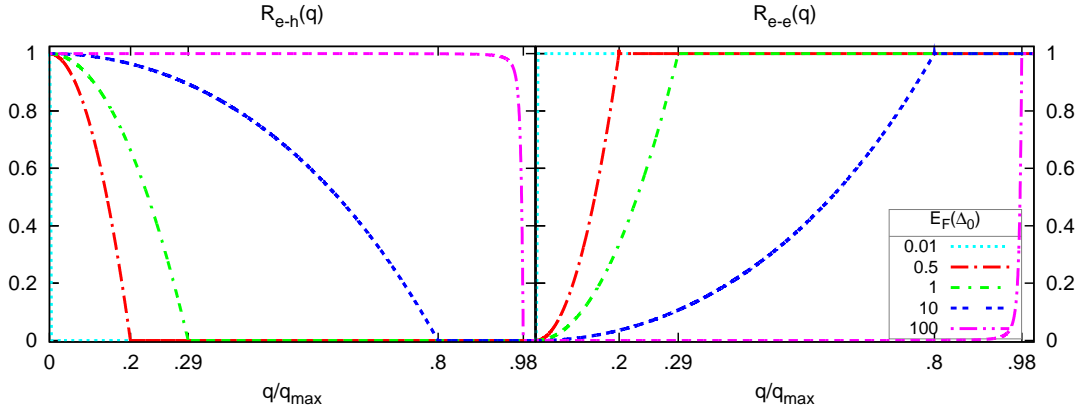


Fig. 3.2. Dependencia de los coeficientes de reflexión electrón - hueco y electrón - electrón con respecto a la componente  $q$  del vector de onda para energía de excitación  $E = 0$  y normalizada al valor de  $q_{max}$  para cada valor de dopaje. Se ilustran los coeficientes a diferentes valores de dopaje.

Cuando  $E_F = 100\Delta_0 \equiv E_{FS}$  observamos de la Fig. 3.2, que las reflexiones de *Andreev* tienen probabilidad uno para la mayoría de valores de  $q$ , mientras que las reflexiones electrón - electrón son cero excepto para  $q \approx q_{max}$ . A medida que reducimos el dopaje las reflexiones de *Andreev* disminuyen a medida que  $q$  aumenta y tienden a cero cuando  $q \approx q_{max}$ . Debemos aclarar que el valor de  $q_{max}$  es determinado con respecto a la energía de Fermi en el grafeno en estado normal como

$$q_{max} \equiv \frac{E + E_F}{\hbar v_F}, \quad (3.9)$$

debido a que se deben restringir los posibles valores de  $q$  a  $q_{max}$  como en (3.9), ya que al tener  $q > q_{max}$  las funciones de onda (3.2) son evanescentes y los coeficientes de reflexión son nulos.

Aquí es importante resaltar que en el caso de una juntura convencional **NS**, al tener una escala de la energía de Fermi del metal de  $E_F \sim \Delta_0$  a  $E_{FS}$  con  $E_{FS} [\gg \Delta_0]$  las reflexiones de *Andreev* son nulas, dado que los electrones serían reflejados como electrones por el efecto del escalón de potencial producido por la diferencia de las energías de Fermi. Mientras en nuestro caso esto no ocurre por el tuneamiento de Klein, donde el electrón incidente tiene una probabilidad finita de no ser reflejado y formar un par de Cooper en la región superconductora.

Ahora se determinan los coeficientes de reflexión teniendo en cuenta todos los posibles canales



de dispersión  $q$  como,

$$R_{e-e}(E) = \int_0^{q_{max}} dq \|u_1(E, q)^2\| \quad \text{y} \quad R_{e-h}(E) = \int_0^{q_{max}} dq \left\| v_1(E, q)^2 \frac{\cos(\alpha_h(E, q))}{\cos(\alpha_e(E, q))} \right\|, \quad (3.10)$$

donde los límites de integración 0 y  $q_{max}$  hacen referencia a incluir los electrones incidiendo desde una dirección perpendicular hasta una dirección paralela a la interfase, respectivamente, y son ilustrados en Fig. 3.3

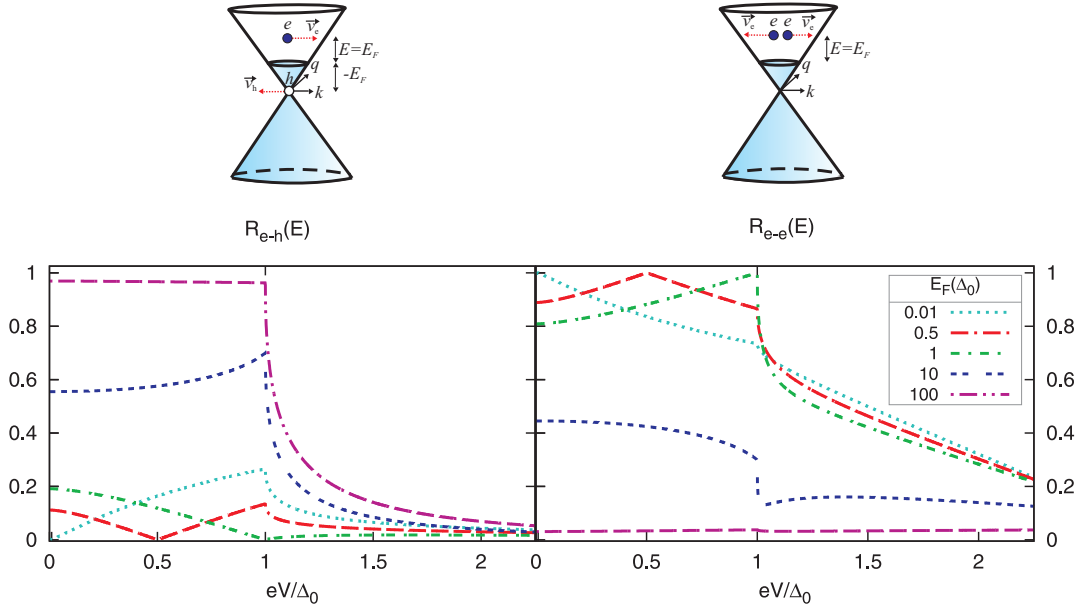


Fig. 3.3. Dependencia con respecto a la energía de excitación  $E \equiv eV$  normalizada al potencial de pares  $\Delta_0$  del coeficiente de reflexión electrón - hueco y electrón - electrón integrado con respecto a  $q$ . Se grafica el coeficiente a diferentes valores de dopaje.

De la Fig. 3.3 se concluye que a dopajes menores que el potencial de pares  $\Delta_0$ , el coeficiente de reflexión electrón - hueco es cero para una energía de excitación  $E = E_F$ , ya que para ese valor de energía de excitación la partícula reflejada como hueco se encuentra exactamente en el punto de Dirac ( $E = 0$  de la Fig. 1.6) con densidad de estados igual a cero, y por lo tanto el coeficiente de reflexión electrón - electrón es igual a la unidad. Para dopajes mayores al potencial de pares se determina que la probabilidad de una reflexión electrón - hueco tiende a la unidad para  $E < \Delta_0$  y el coeficiente de reflexión electrón - electrón tiende a cero. Para  $E > \Delta_0$  los coeficientes de reflexión electrón - electrón y electrón - hueco decaen ya que las cuasipartículas se transmiten al superconductor.

### 3.2.2. Conductancia Diferencial

La conductancia diferencial relativa en una juntura **GS** puede ser encontrada por medio del modelo de Blonder, Tinkham, Klapwijk (BTK) [59] en el modelo extendido para el caso del grafeno [23] a partir de los coeficientes de reflexión descritos en las relaciones (3.8) y puede ser

escrita a  $T = 0$  K como

$$\begin{aligned}
 G(eV) &\equiv \frac{dI}{dV} = G_0 \int_0^{q_{max}} dq (1 - R_{e-e}(E, q) + R_{e-h}(E, q)), \\
 &= G_0 \int_0^{q_{max}} dq \left( 1 - \|u_1(E, q)\|^2 + \|v_1(E, q)\|^2 \left\| \frac{\cos(\alpha_h(E, q))}{\cos(\alpha_e(E, q))} \right\| \right),
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

donde  $G_0$  es la conductancia balística de una lamina de grafeno de ancho  $W$  que es proporcional a la densidad de estados en el estado normal calculada en la superficie de Fermi y cuyo límite superior de integración viene dado por  $\frac{E+E_F}{\hbar v_F}$ . En la primera expresión de (3.11) se observa que la reflexión normal (descrita por  $R_{e-e}(E, q)$ ) reduce la conductancia, mientras que una reflexión de Andreev (descrita por  $R_{e-h}(E, q)$ ) incrementa la conductancia, debido a que ésta induce un par de Cooper en el superconductor.

La conductancia diferencial para una juntura grafeno en estado normal - grafeno en estado superconductor se comporta como se puede observar en la Fig. 3.4 en donde se observa el comportamiento de la conductancia diferencial para diferentes dopajes  $\gamma$  del grafeno en estado normal en términos del potencial de pares (i.e.,  $E_F = \gamma * \Delta_0$ ).

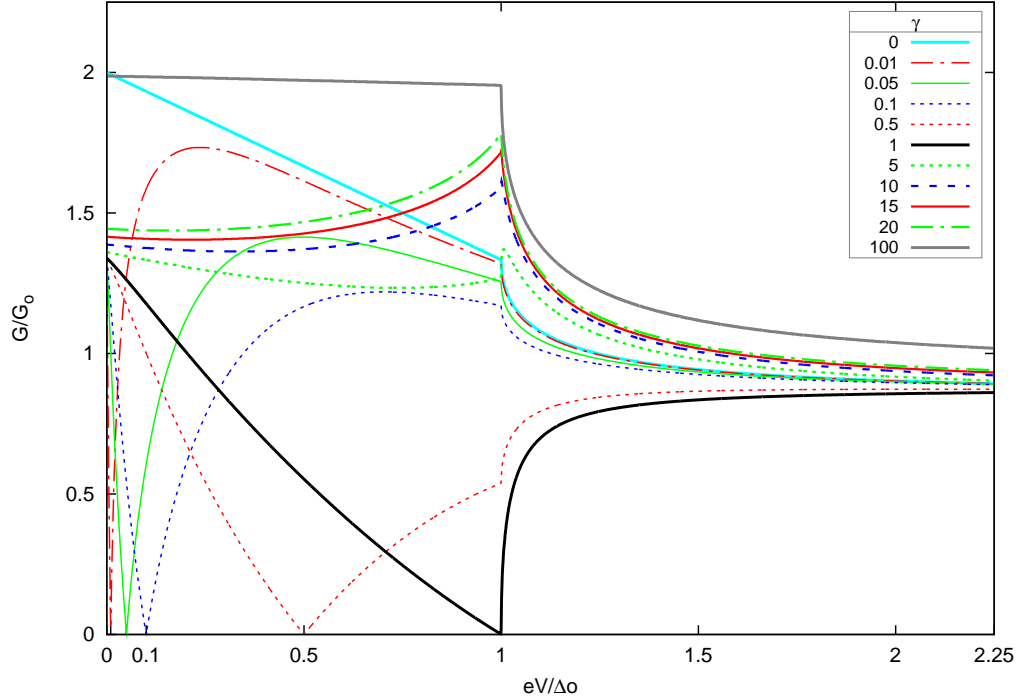


Fig. 3.4. Conductancia diferencial normalizada a  $G_0$  para una juntura **GS** conformada por grafeno, y en función de la energía de excitación  $E \equiv eV$  normalizada al potencial de pares  $\Delta_0$ .

De la Fig. 3.4 se concluye que para un dopaje  $\gamma$  igual a 100 (i.e.,  $E_F = E_{FS}$ ), la conductancia diferencial se comporta de igual manera a la de una juntura convencional metal normal - superconductor [59]. Adicionalmente se observa que para dopajes menores o iguales al potencial de pares  $\Delta_0$ , la conductancia diferencial es nula para el valor de  $eV = E_F$ , lo cual se debe a que la probabilidad de reflexión electrón - hueco es cero para  $E = E_F$  como vimos anteriormente.

El significado del límite superior de integración  $q_{max}$  es que se tienen en cuenta no solamente los electrones incidentes perpendicularmente a la interfase sino que adicionalmente se tienen en cuenta los electrones que inciden desde un ángulo de 0 hasta  $\frac{\pi}{2}$ . Estos resultados coinciden con los obtenidos por C. W. J. Beenakker [8].

### 3.3. Juntura Grafeno en Estado Normal - Aislante - Grafeno en Estado Superconductor

En esta sección incluimos un aislante el cual vamos a modelar como una barrera de potencial de ancho  $d$  y altura  $V_0$  entre  $x = 0$  y  $x = d$ , que en el límite  $d \rightarrow 0$  y  $V_0 \rightarrow \infty$  representa<sup>20</sup> un potencial delta de Dirac [9, 10]. Las funciones de onda (3.2) y (3.4) son validas en la región  $-\infty < x < 0$  y  $d < x < \infty$ , respectivamente, y en la región del aislante  $0 \leq x \leq d$  tenemos soluciones de electrón y hueco con velocidad de grupo positiva y negativa resultado de las reflexiones en las interfase en  $x = 0$  y  $x = d$ , de manera que la función de onda en la región del aislante está dada por,

$$\begin{aligned} \Phi_I(\mathbf{r}) &= \Psi_{>}^{I_e}(\mathbf{r}) + \Psi_{<}^{I_e}(\mathbf{r}) + \Psi_{<}^{I_h}(\mathbf{r}) + \Psi_{>}^{I_h}(\mathbf{r}) \\ &= e^{iK_D x} e^{iqy} \left\{ u_2 e^{ik_{I_e} x} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\alpha_{I_e}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + u_3 e^{-ik_{I_e} x} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\alpha_{I_e}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right. \\ &\quad \left. + v_2 e^{ik_{I_h} x} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ e^{i\alpha_{I_h}} \end{pmatrix} + v_3 e^{-ik_{I_h} x} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -e^{-i\alpha_{I_h}} \end{pmatrix} \right\}, \end{aligned} \quad (3.12)$$

donde  $u_2$ ,  $v_3$ ,  $u_3$  y  $v_2$  son las amplitudes de probabilidad para un electrón o hueco propagándose con velocidad de grupo positiva o negativa, respectivamente, dentro del aislante. En la función de onda (3.12) se distingue que la energía de los electrones y huecos se mide con respecto a la diferencia entre la altura de la barrera de potencial y la energía de Fermi (i.e.,  $V_0 - E_F$ ), por lo tanto la componente  $k$  del vector de onda  $\mathbf{k}$  para electrones y huecos en la región del aislante son dados por,

$$\begin{aligned} k_{I_e} &\equiv \text{sgn}(E + (V_0 - E_F)) \sqrt{\left(\frac{E + (V_0 - E_F)}{\hbar\nu_F}\right)^2 - q^2} \Rightarrow e^{\pm i\alpha_{I_e}} \equiv \hbar\nu_F \frac{k_{I_e} \pm iq}{E + (E_F - V_0)} \\ k_{I_h} &\equiv \text{sgn}(E - (V_0 - E_F)) \sqrt{\left(\frac{E - (V_0 - E_F)}{\hbar\nu_F}\right)^2 - q^2} \Rightarrow e^{\pm i\alpha_{I_h}} \equiv \hbar\nu_F \frac{k_{I_h} \pm iq}{E - (E_F - V_0)} \end{aligned} \quad (3.13)$$

Las amplitudes de probabilidad  $u_1$ ,  $u_2$ ,  $v_1$ ,  $v_2$ ,  $u_3$ ,  $v_3$ ,  $C_{qe}^+$  y  $C_{qh}^-$  se obtienen al exigir la conti-

<sup>20</sup>Donde el orden del ancho es  $d < 0,1 a_0$ , con  $a_0$  la distancia inter - atómica entre átomos de carbono.

nidad de la función de onda en las fronteras en  $x = 0$  y en  $x = d$ , por lo tanto,

$$\Phi_G(\mathbf{r}) \Big|_{x=0} = \Phi_I(\mathbf{r}) \Big|_{x=0}, \quad (3.14a)$$

y

$$\Phi_S(\mathbf{r}) \Big|_{x=d} = \Phi_I(\mathbf{r}) \Big|_{x=d}, \quad (3.14b)$$

como las funciones de onda (3.2), (3.4) y (3.12) son bi-espinoriales obtenemos un sistema de ecuaciones  $8 \times 8$ , cuyas soluciones en la aproximación de *Andreev* se encuentran en el apéndice D. A continuación se determinan los coeficientes de reflexión de electrón - electrón y electrón - hueco para la junta.

### 3.3.1. Coeficientes de Reflexión

Los coeficientes de reflexión son dados por la misma expresión que encontramos en (3.8), donde el efecto del aislante es representado por el término adimensional denominado fortaleza ( $\chi \equiv \frac{V_0 d}{\hbar v_F}$ ) y se presenta en las amplitudes de probabilidad determinadas por las condiciones de frontera (3.14), por tal razón reemplazando los valores  $u_1$  y  $v_1$  estos coeficientes de reflexión son dados por

$$R_{e-e}(E, q) = \|u_1(E, q)^2\| \quad \text{y} \quad R_{e-h}(E, q) = \left\| v_1(E, q)^2 \frac{\cos(\alpha_h(E, q))}{\cos(\alpha_e(E, q))} \right\|, \quad (3.15)$$

con  $u_1$  y  $v_1$  dados en el apéndice D.

De los coeficientes de reflexión (3.15) se analiza el efecto del aislante en los casos límite de un grafeno en estado normal poco dopado (e.g.,  $E_F \approx 0$ ) o fuertemente dopado (e.g.,  $E_F \approx E_{FS}$ ), ya que como vimos en la sección 3.2 en las juntas con grafeno se presenta un comportamiento no convencional al variar el dopaje del grafeno como se observa en la figura Fig. 3.5, de manera que lo analizamos para este tipo de junta en los casos límites.

De la Figura Fig.3.5 se concluye que a bajos dopajes la barrera de potencial es transparente, ya que los electrones incidentes con  $q < E_F$  son prácticamente perpendiculares, es decir, el ángulo de transmisión  $\alpha_I \sim 0$  y por lo tanto los electrones se pueden transmitir con probabilidad uno independiente de la fortaleza de la barrera. Esto es nuevamente una consecuencia del tunelamiento de Klein, el cual es máximo a incidencia perpendicular. Para dopajes mayores  $E_F > \Delta_0$  el ángulo de incidencia  $\alpha_I$  aumenta y la probabilidad de transmisión disminuye, es decir, el coeficiente de reflexión electrón - electrón aumenta y el coeficiente de reflexión electrón - hueco disminuye, dicho comportamiento se repite para un periodo de  $\pi$  del valor de la fortaleza  $\chi$ .

Con base en los coeficientes de reflexión analizados en la sección 3.3.1, ahora determinamos la conductancia diferencial para los mismos valores de dopaje que en el caso de una junta **GS**.

### 3.3.2. Conductancia Diferencial

La conductancia diferencial de una junta **GIS** puede ser estudiada como en el caso de la junta **GS**, por medio del modelo de Blonder, Tinkham, Klapwijk (BTK) [23] en términos de

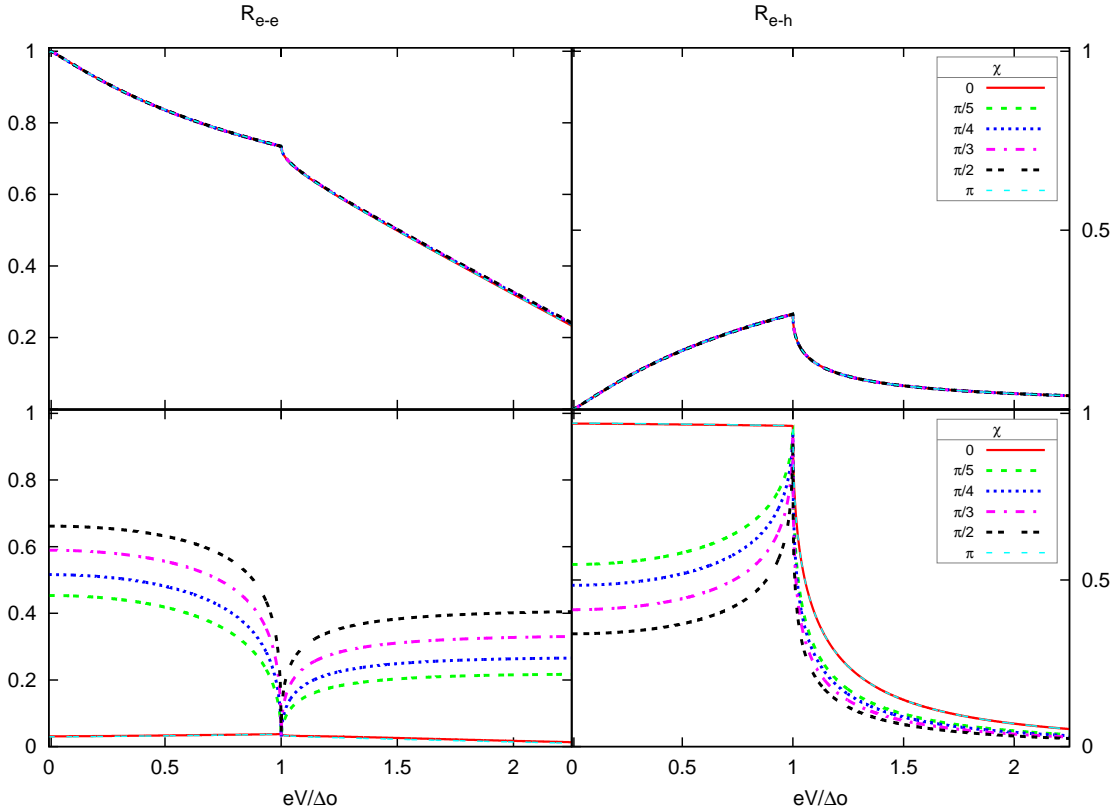


Fig. 3.5. Dependencia con respecto a la energía de excitación  $E \equiv eV$  normalizada al potencial de pares  $\Delta_0$  del coeficiente de reflexión electrón - hueco y electrón - electrón integrado con respecto a  $q$  en una juntura **GIS**. En el panel superior se encuentran los coeficientes de reflexión para un grafeno poco dopado (la energía de Fermi del grafeno en estado normal es  $0,01\Delta_0$ ). En el panel inferior se encuentran los coeficientes de reflexión para un grafeno fuertemente dopado (la energía de Fermi del grafeno en estado normal es  $100\Delta_0 = E_{FS}$ ).

los coeficientes de reflexión descritos en las relaciones (3.15) y puede ser escrita como

$$G(eV) = G_0 \int_0^{q_{max}} dq \left( 1 - \|u_1(E, q)\|^2 + \|v_1(E, q)\|^2 \left\| \frac{\cos(\alpha_h(E, q))}{\cos(\alpha_e(E, q))} \right\| \right), \quad (3.16)$$

donde las amplitudes de probabilidad  $u_1(E, q)$  y  $v_1(E, q)$  son las dadas en (D.5). A continuación se ilustran la conductancias diferencial de diferentes valores de dopaje al variar el la fortaleza del aislante.

De la figura Fig. 3.8 se concluye que para un dopaje  $E_F \leq \Delta_0$  la conductancia diferencial de una juntura **GIS** es la misma que el caso de una juntura **GS**, esto debido a que el aislante se comporta como si su fortaleza fuera nula, es decir transparente, ya que los electrones atraviesan perfectamente el aislante, esto debido a que para estos valores de dopaje la incidencia de los electrones son casi perpendiculares, ya que los electrones en la región del aislante cumplen  $\alpha_I \approx 0$  como se ve en la Fig. 3.7.

Estos resultados son nuevos y muestran un efecto del tunelamiento de Klein a bajos dopajes del grafeno en estado normal en una juntura **GIS**.

Al observar la figura Fig. 3.8 se deduce que a medida que aumenta el dopaje ( $E_F > \Delta_0$ ) los electrones inciden en canales que no son necesariamente perpendiculares, por lo que las

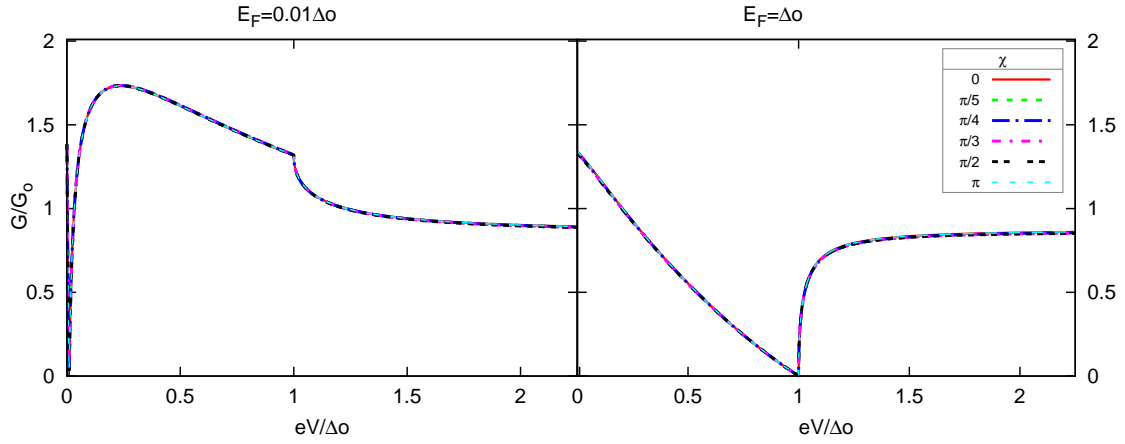


Fig. 3.6. Conductancia diferencial normalizada a  $G_0$  para una juntura NIS consistente de grafeno, para valores de dopaje bajos en términos de  $\Delta_0$  y en función de la energía de excitación  $E \equiv eV$  normalizada al potencial de pares  $\Delta_0$ .

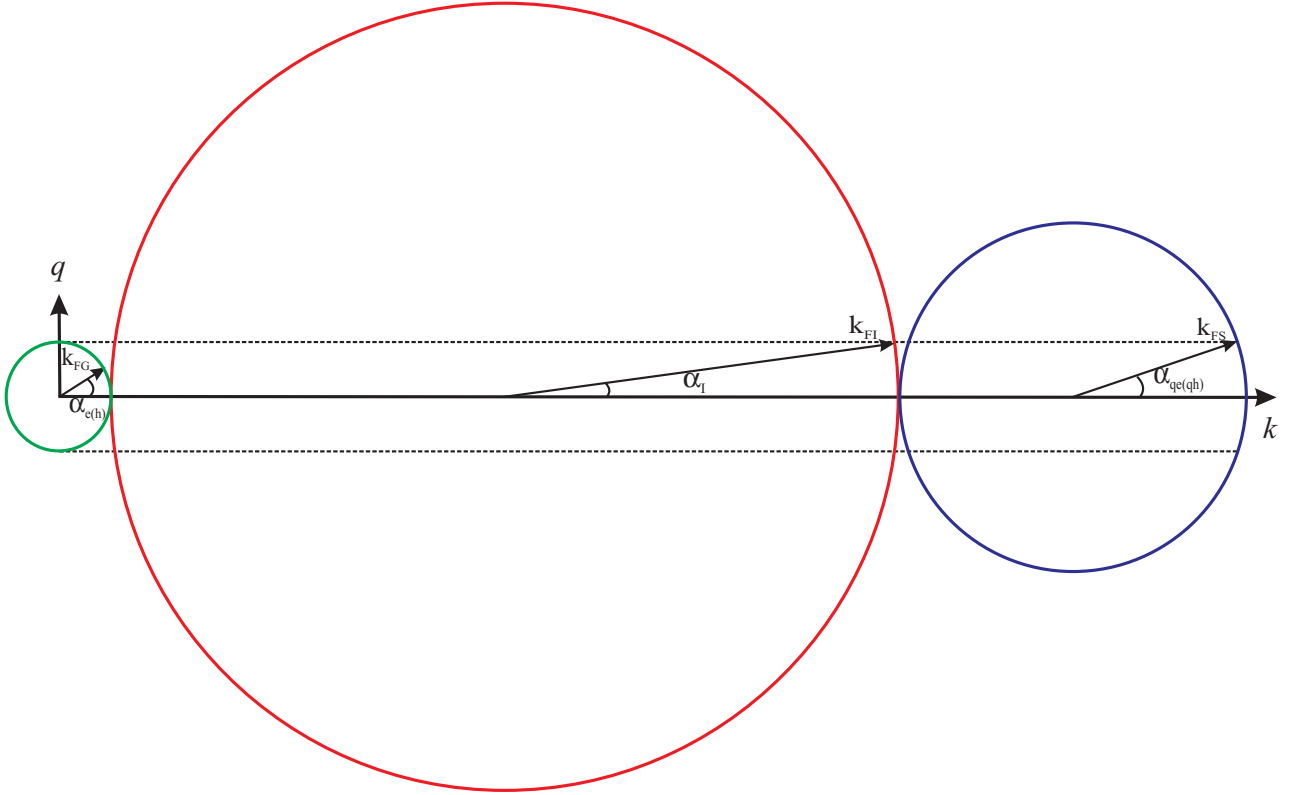


Fig. 3.7. Grafica donde se ilustra la limitación de los posibles ángulos de dispersión en cada una de las regiones. El radio de los círculos representa el vector de onda de Fermi en cada una de las regiones (Verde: Grafeno en estado normal, Rojo: Aislante, Azul: Grafeno es estado superconductor) Los máximos valores para cada una de las componentes del vector de onda son dados por el radio  $k_F$  de la esfera de Fermi en cada región.

reflexiones de electrón - electrón aumentan y disminuye la conductancia diferencial a medida que aumenta el valor de la fortaleza  $\chi$  del aislante, el efecto del aislante tipo delta de Dirac en una juntura **GIS** es recurrente y su periodo es  $n\pi$  con  $n$  un numero entero. Esto debido a que el coeficiente de transmisión en términos del ángulo incidente  $\alpha_{e(h)}$  y el ángulo dispersado en el

aislante  $\alpha_{I_{e(h)}}$  (3.17) asociado a la barrera [33] es

$$T(\alpha_{e(h)}) = \frac{\cos^2(\alpha_{I_{e(h)}}) \cos^2(\alpha_{e(h)})}{\left[ \cos(k_I d) \cos(\alpha_{e(h)}) \cos(\alpha_{I_{e(h)}}) \right]^2 + \sin^2(k_I d) \left[ 1 - \text{sgn}(E) \text{sgn}(E - V_0) \sin(\alpha_{I_{e(h)}}) \sin(\alpha_{e(h)}) \right]^2}, \quad (3.17)$$

por lo tanto con la condición de valores de  $\chi \equiv k_I d = n\pi$  el coeficiente (3.17) es uno e independiente del valor de  $q$  ó  $\alpha_{e(h)}$ , donde se ha asumido una barrera de ancho  $d$  muy alta  $V_0 \gg E, E_F$ .

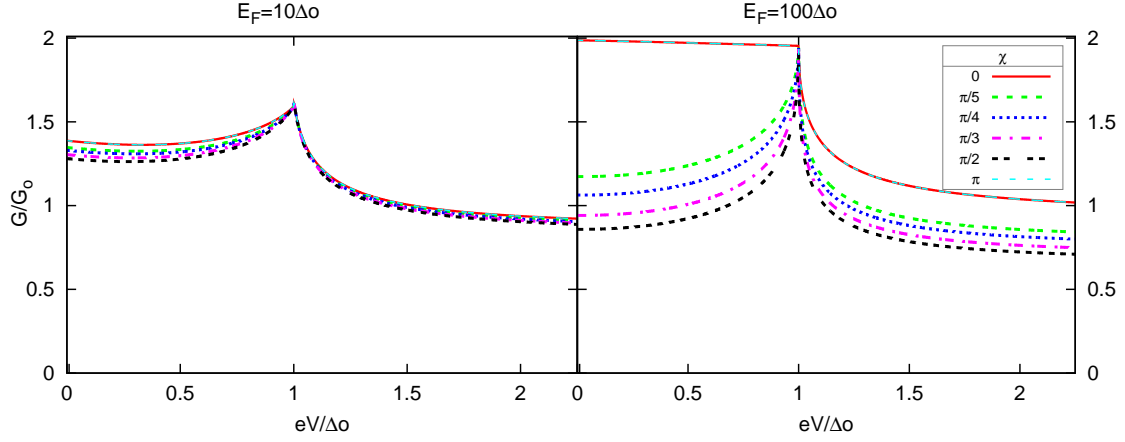


Fig. 3.8. Conductancia diferencial normalizada a  $G_0$  para una juntura GIS consistente de grafeno, para valores de dopaje altos en términos de  $\Delta_0$  y en función de la energía de excitación  $E \equiv eV$  normalizada al potencial de pares  $\Delta_0$ .

El comportamiento para  $E_F = 100\Delta_0 = E_{FS}$  es similar al observado para una juntura convencional **GIS** con un valor de fortaleza igual a 0,5 [59], pero al aumentar el valor de la fortaleza se evidencian diferencias, la conductancia diferencial no disminuye a cero como en una juntura **GIS** convencional sino a un valor finito  $\approx 0,85$  coincidiendo con los resultados obtenidos por S. Bhattacharjee *et al.* para una juntura **GIS** con un grafeno fuertemente dopado  $E_F = E_{FS}$  [9].

### 3.4. Discusión

Las propiedades de transporte en un juntura **GS** o **GIS** donde se presenta borde *Zigzag*, son analizadas por medio de los coeficientes de reflexión electrón - electrón y electrón - hueco, distinguiendo el efecto de la variación de dopaje que se presenta en los coeficientes. El coeficiente de reflexión electrón - hueco es nulo cuando la energía de excitación es igual al dopaje, esto solo se presenta cuando el dopaje es menor o igual al potencial de pares, y es una manifestación de la transición de retroreflexiones de *Andreev* a reflexiones de *Andreev* especulares. El rango de dopaje donde se puede presentar los dos tipos de reflexiones de *Andreev*, se caracteriza porque el efecto de un aislante tipo delta de dirac es nulo ya que se presenta *tunelamiento de Klein* y los portadores de carga pueden atravesar la barrera de potencial (i.e., el aislante) perfectamente.

En el caso de una grafeno en estado normal dopado ( $E_{FG} > \Delta_0$ ) solo se presenta retroreflexiones de *Andreev*, y cuando la energía de excitación es igual al potencial de pares se presenta un estado resonante donde las reflexiones de *Andreev* son máximas. De manera que, los electrones incidentes tiene la energía necesaria para inducir una cuasipartícula. El efecto del aislante en

los coeficientes de reflexión para un grafeno dopado es periódico y se refleja en la conductancia diferencial. El periodo del efecto del aislante depende del ancho de la barrera y para el caso de un barrera muy alta y delgada su valor es  $\pi$ .